УДК 519.85

К.Х. Зеленський, О.М. Семанишин

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВМІСТУ РОЗЧИНЕНОГО КИСНЮ ТА БІОХІМІЧНОГО ВЖИВАННЯ КИСНЮ У ПОВЕРХНЕВИХ ВОДАХ

При формуванні якості природних вод однією із найбільш значимих є концентрація асимілюючої спроможності водного об’єкту, тобто спроможності природних вод до розкладання компонентів, що містяться в твердих та рідинних відходах. Найбільш значимими за своїм впливом на довкілля є відходи органічного походження. Процес біохімічного окислення органічних речовин здійснюється під впливом бактерій згідно рівнянню: органічні речовини + кисень → вода + двоокис вуглецю + решта речовин. Це рівняння, що справджується для аеробного середовища, тобто там, де присутній розчинений кисень, показують, що розкладання органічних речовин можна вважати еквівалентним реакції окислювання, яка призводить до зниження концентрації розчиненого кисню, що може призвести до порушення екологічної рівноваги у річці.

Величина розчиненого у воді кисню (РК) є гарний загальний показник життєдіяльності водного середовища і відіграє важливу роль в екосистемі річки. Вміст у воді кисню належить до основних інтегральних показників, що визначають якість поверхневих вод як одного з найцінніших природних ресурсів.

Зважаючи на те, що результат впливу будь-якого типу органічного забруднення полягає у поглиненні розчиненого кисню, концентрацію забруднюючої речовини органічного походження зазвичай визначають кількістю кисню, необхідного для повного його окислення, тобто за допомогою так званої біохімічної потреби у кисні (БПК). У силу важливості взаємодії між БПК та РК стало звичним говорити про моделі або системи РК—БПК.

За останні роки у зв’язку з посиленим антропогенним впливом кисневий режим багатьох річок та озер стає все напруженішим, збільшується частота та протяжність заморних явищ. При цьому значна кількість РК витрачається на розкладання легко окислюємих органічних речовин. Як відомо, мірою вмісту органічної речовини і інтенсивності її деструкції (розкладання) є біохімічне вживання кисню (БВК). У силу тісного взаємозв’язку між змінюванням кількості РК та наявністю у воді органічної речовини велике значення набуває використання математичної моделі РК—БВК.

Динаміка РК у водоймах та водотоках описується рівнянням

$$\begin{gathered}\frac{\partial C_{pk}}{\partial t}+\frac{\partial(v_x C_{pk})}{\partial x}+\frac{\partial(v_y C_{pk})}{\partial y}+\frac{\partial(v_z C_{pk})}{\partial z}= \\ =\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial C_{pk}}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial C_{pk}}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial C_{pk}}{\partial z}\right)- \\ -k_1 C_{bpk}+k_2^*(C_{pk}^*-C_{pk})+f_{pk}.\end{gathered} \quad (1)$$

© К.Х. Зеленський, О.М. Семанишин, 2007

 ISSN 1562-9945

Враховуючи, що значна маса органічної речовини убуває за рахунок біохімічного розкладання (деструкції) органічної речовини і седиментації речовин, що підпорядковуються біохімічному окисленню, отримуємо рівняння, що описує у водоймі динаміку БВК:

$$\frac{\partial C_{bpk}}{\partial t}+\frac{\partial (v_x C_{bpk})}{\partial x}+\frac{\partial (v_y C_{bpk})}{\partial y}+\frac{\partial (v_z C_{bpk})}{\partial z}= \\ =\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x^*\frac{\partial C_{bpk}}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y^*\frac{\partial C_{bpk}}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z^*\frac{\partial C_{bpk}}{\partial z}\right)-(k_1+k_{ced})C_{bpk}+f_{bpk}, \tag{2}$$

де k_{ced} — константа швидкості седиментації; f_{bpk} – джерела і витоки органічної речовини (БВК); v_x, v_y, v_z – швидкості течії води; D_x^*, D_y^*, D_z^* – коефіцієнти турбулентної дифузії.

Якщо рідина у водоймі є нестискаєма, тобто швидкості руху води є сталі, а також вважати, що коефіцієнти дифузії є сталі на ділянці річки, що розглядається, також є сталі, система рівнянь, що описує баланс РК—БВК набуває спрощеного вигляду:

$$\frac{\partial C_{pk}}{\partial t}+v_x\frac{\partial C_{pk}}{\partial x}+v_y\frac{\partial C_{pk}}{\partial y}+v_z\frac{\partial C_{pk}}{\partial z}= \\ =D_x\frac{\partial^2 C_{pk}}{\partial x^2}+D_y\frac{\partial^2 C_{pk}}{\partial y^2}+D_z\frac{\partial^2 C_{pk}}{\partial z^2}-k_1C_{bpk}+k_2^*(C_{pk}^*-C_{pk})+f_{pk}. \tag{3}$$

$$\frac{\partial C_{bpk}}{\partial t}+v_x\frac{\partial C_{bpk}}{\partial x}+v_y\frac{\partial C_{bpk}}{\partial y}+v_z\frac{\partial C_{bpk}}{\partial z}= \\ =D_x^*\frac{\partial^2 C_{bpk}}{\partial x^2}+D_y^*\frac{\partial^2 C_{bpk}}{\partial y^2}+D_z^*\frac{\partial^2 C_{bpk}}{\partial z^2}-(k_1+k_{ced})C_{bpk}+f_{bpk}. \tag{4}$$

Для розв’язання наведеної системи диференціальних рівнянь у частинних похідних потрібно задати початкові та межові умови, які визначаються за даними натурних випробувань. Крім того, необхідно задати складові вектора швидкості течії **v** що визначаються за допомогою відповідних вимірювань за деякий проміжок часу або шляхом розв’язання відповідної гідродинамічної задачі для даного водойму або водотоку. У загальному випадку потрібно вирішувати наведену задачу разом із задачею гідродинаміки течії.

Початкові умови набувають вигляду:

$$C_{pk}(x,y,z,t_0)=C_{pk}^0(x,y,z);\ C_{bpk}(x,y,z,t_0)=C_{bpk}^0. \tag{5}$$

Запишемо межові умови відносно змінної x, розглядаючи ділянку водойму у межах $x\in[x_0,x_1]$:

$$C_{pk}(x_0,y,z,t)=C_{pk}^0(y,z,t);\ \left.\frac{\partial C_{pk}}{\partial x}\right|_{x=x_1}=0; \tag{6}$$

$$C_{bpk}(x_0,y,z,t)=C_{bpk}^0(y,z,t);\ \left.\frac{\partial C_{bpk}}{\partial x}\right|_{x=x_1}=0; \tag{6’}$$

$$\left[v_yC_{pk}(x,y,z,t)-D_y\frac{\partial C_{pk}}{\partial y}\right]_{y=y_0}=0;\ \left[v_yC_{pk}(x,y,z,t)-D_y\frac{\partial C_{pk}}{\partial y}\right]_{y=y_1}=0; \tag{7}$$

$$\left[v_y C_{bpk}(x,y,z,t) - D_y^* \frac{\partial C_{bpk}}{\partial y}\right]_{y=y_0} = 0;\ \left[v_y C_{bpk}(x,y,z,t) - D_y^* \frac{\partial C_{bpk}}{\partial y}\right]_{y=y_1} = 0; \tag{7'}$$

$$C_{pk}(x,y,0,t) = C_{at}^0;\ \left[v_z C_{pk}(x,y,z,t) - D_z \frac{\partial C_{pk}}{\partial z}\right]_{z=h} = m_{pk}^{dn}; \tag{8}$$

$$C_{bpk}(x,y,0,t) = 0;\ \left[v_z C_{bpk}(x,y,z,t) - D_z^* \frac{\partial C_{bpk}}{\partial z}\right]_{z=h} = m_{bpk}^{dn}, \tag{8'}$$

де m_{pk}^{dn}, m_{bpk}^{dn} – потоки РК та БВК, що надходять у донні відкладання на глибині h, C_{at} – концентрація кисню у повітрі над водоймою.

Визначення функцій f_{pk}, f_{bpk} залежить від додаткових факторів, що впливають на змінювання концентрації у воді розчиненого кисню та органічних речовин. До таких факторів належать: фотосинтез, вживання кисню водоростями, потреби у кисню на дихання бентосних організмів та хімічне окислення речовин, що надходять у донні відкладання. Всі ці фактори можна урахувати, якщо запровадити їхні кількісні характеристики: питому первинну продукцію кисню при фотосинтезі, питомі швидкості вживання кисню під час дихання водних організмів, питому інтенсивність вживання кисню при хімічних перетвореннях тощо. Урахування зазначених чинників призводить до нелінійної залежності функцій f_{pk}, f_{bpk} від температури води, концентрації C_{pk}, радіаційного впливу сонячної енергії на поверхні води, коефіцієнта освітленості води.

Отже, крайова задача (1)—(8) є нелінійна крайова задача у частинних похідних відносно шуканих концентрацій C_{pk}, C_{bpk}.

Зважаючи на суттєву складність цієї задачі, у даній роботі розглянемо спрощену задачу відшукання балансу РК—БВК, тобто вважатимемо функції f_{pk}, f_{bpk} сталими, що дозволяє на першому етапі розв’язати лінійну крайову задачу, а на другому – розв’язувати нелінійну крайову задачу за допомогою ітераційної схеми вигляду

$$C_{pk}^{(m)}(x,y,z,t) = F_1[C_{pk}^{(m-1)}, C_{bpk}^{(m-1)}];\ C_{bpk}^{(m)}(x,y,z,t) = F_2[C_{pk}^{(m-1)}, C_{bpk}^{(m-1)}]. \tag{9}$$

Запишемо крайову задачу, що описує процеси біохімічного вживання кисню у такому вигляді:

$$\frac{\partial C'_{bpk}}{\partial t} = D_x^* \frac{\partial^2 C'_{bpk}}{\partial x^2} + D_y^* \frac{\partial^2 C'_{bpk}}{\partial y^2} + D_z^* \frac{\partial^2 C'_{bpk}}{\partial z^2} - b_B C'_{bpk} + f'_{bpk}, \tag{10}$$

де $C'_{bpk}(x,y,z,t) = C_{bpk}(x,y,z,t) \exp\left[-\frac{v_x}{2D_x^*}x - \frac{v_y}{2D_y^*}y - \frac{v_z}{2D_z^*}z\right]$;

$$f'_{bpk}(x,y,z,t) = f_{bpk}(x,y,z,t) \exp\left[-\frac{v_x}{2D_x^*}x - \frac{v_y}{2D_y^*}y - \frac{v_z}{2D_z^*}z\right]$$

$$b_B = b_0 + k_1 + k_{ced};\ b_0 = \frac{v_x^2}{4D_x^*} + \frac{v_y^2}{4D_y^*} + \frac{v_z^2}{4D_z^*}.$$

 ISSN 1562-9945

Початкова умова

$$C'_{bpk}(x,y,z,t)|_{t=0} = C^0_{bpk}\exp\left[-\frac{v_x}{2D^*_x}x - \frac{v_y}{2D^*_y}y - \frac{v_z}{2D^*_z}z\right]; \tag{11}$$

Межові умови набувають вигляду

$$C'_{bpk}(x,y,z,t)|_{x=0} = C^0_{bpk}\exp\left[-\frac{v_y}{2D^*_y}y - \frac{v_z}{2D^*_z}z\right]; \ \left.\frac{\partial C'_{bpk}}{\partial x}\right|_{x=x_1} = 0; \tag{12}$$

$$\left[\frac{v_y}{2}C'_{bpk} - D^*_y\frac{\partial C'_{bpk}}{\partial y}\right]_{y=y_0} = 0; \ \left[\frac{v_y}{2}C'_{bpk} + D^*_y\frac{\partial C'_{bpk}}{\partial y}\right]_{y=y_1} = 0; \tag{13}$$

$$C'_{bpk}(x,y,z,t)|_{z=0} = 0;$$

$$\left[\frac{v_z}{2}C'_{bpk} + D^*_z\frac{\partial C'_{bpk}}{\partial z}\right]_{z=h} = m^{dn}_{bpk}\exp\left[-\frac{v_x}{2D^*_x}x - \frac{v_y}{2D^*_y}y - \frac{v_z}{2D^*_z}h\right]. \tag{14}$$

Розв’язання крайової задачі (10)—(14) будемо шукати за методом інтегральних перетворень у скінчених межах. Застосовуючи послідовно інтегральні перетворення за просторовими координатами z, y, x, отримуємо розв’язок у вигляді ряду за власними функціями:

$$C'_{bpk}(x,y,z,t) = \sum_{k,l,m}\sin\mu_m x\left(\cos\beta_{k,l}y + \frac{v_y}{2D^*_y\beta_{k,l}}\sin\beta_{k,l}y\right)\sin\gamma_k z\cdot$$

$$\cdot\left\{A_{m,l,k}\left[1 - e^{-\delta^2_{m,l,k}t}\right] + G_{m,l,k}e^{-\delta^2_{m,l,k}t}\right\} \tag{15}$$

У цьому виразі:

$$\delta^2_{m,l,k} = \mu^2_m + \beta^2_{k,l}; \ A_{m,l,k} = \overline{\overline{f'_{bpk}}} + \overline{\overline{R_z}}.$$

Власні значення отримуємо як розв’язки характеристичних рівнянь:

$$v_z\sin\gamma h - \frac{2}{h}D^*_z\gamma h\cos\gamma h = 0;$$

$$v_y\cos\beta_{k,l}y_1 + \left(\frac{v^2_y}{4D^*_y} - \beta_{k,l}D^*_y\right)\sin\beta_{k,l}y_1 = 0.$$

$$\overline{\overline{f'_{bpk}}} = f'_{bpk}g_z g_y g_x; \ g_z = \frac{C^0_{bpk}}{\alpha^2_z + \gamma^2_k}[\alpha_z(\cos\gamma_k h - \gamma_k\sin\gamma_k h)e^{-\alpha_z h} - \alpha_z];$$

$$\alpha_z = \frac{v_z}{2D^*_z};$$

$$g_y = \frac{1}{\alpha^2_y + \beta^2_{k,l}}\left[\left(\beta_{k,l}\cos\beta_{k,l}y_1 + \alpha_y\frac{v_y}{2D^*_y\beta_{k,l}}\sin\beta_{k,l}y_1\right)e^{-\alpha_y y_1} - \beta_{k,l}\right];$$

$$\alpha_y = \frac{v_y}{2D^*_y};$$

$$g_x = \frac{1}{\alpha_x^2+\mu_m^2}[\alpha_x(\cos\mu_m x_1 - \mu_m \sin\mu_m x_1)e^{-\alpha_x x_1} - \alpha_x];\ \alpha_x = \frac{v_x}{2D_x^*}$$

$$\overline{\overline{R_z}} = m_{bpk}^{dn} g_y g_x e^{-v_z/(2D_z^*)h} \sin\gamma_k h;\ G_{m,l,k} = g_z g_y g_x C_{bpk}^0.$$

Використовуючи отриманий вираз для $C_{bpk}^{'}(x,y,z,t)$, знайдемо розв'язок крайової задачі (1)—(8) відносно

$$C_{pk}^{'}(x,y,z,t) = C_{pk}(x,y,z,t)\exp\left[-\frac{v_x}{2D_x}x - \frac{v_y}{2D_y}y - \frac{v_z}{2D_z}z\right]. \tag{16}$$

Запишемо рівняння (1) з урахуванням заміни (16) та отриманого розв'язку відносно $C_{bpk}^{'}(x,y,z,t)$ (15). Маємо

$$\frac{\partial C'_{pk}}{\partial t} = D_x\frac{\partial^2 C'_{pk}}{\partial x^2} + D_y\frac{\partial^2 C'_{pk}}{\partial y^2} + D_z\frac{\partial^2 C'_{pk}}{\partial z^2} - k_1\tilde{C}'_{bpk} + k_2^* C'*_{pk} - c_P C'_{pk} + f'_{pk} \tag{17}$$

де $c_P = k_2^* + c_0;\ c_0 = \frac{v_x^2}{4D_x} + \frac{v_y^2}{4D_y} + \frac{v_z^2}{4D_z}$.

$$\tilde{C}_{bpk}^{'} = C_{bpk}^{'}\exp\left[-\tfrac{v_x}{2D_x}x - \tfrac{v_y}{2D_y}y - \tfrac{v_z}{2D_z}z\right] = \exp\left[-\tfrac{v_x}{2D_x}x - \tfrac{v_y}{2D_y}y - \tfrac{v_z}{2D_z}z\right]\cdot$$
$$\cdot\sum_{k,l,m}\sin\mu_m x\left(\cos\beta_{k,l}y + \tfrac{v_y}{2D_y^*\beta_{k,l}}\sin\beta_{k,l}y\right)\sin\gamma_k$$
$$z\left\{A_{m,l,k}\left[1 - e^{-\delta_{m,l,k}^2 t}\right] + G_{m,l,k}e^{-\delta_{m,l,k}^2 t}\right\} \tag{18}$$

$$C_{pk}^{*'} = C_{pk}^*\exp\left[-\frac{v_x}{2D_x}x - \frac{v_y}{2D_y}y - \frac{v_z}{2D_z}z\right];$$
$$f_{pk}^{'} = f_{pk}\exp\left[-\frac{v_x}{2D_x}x - \frac{v_y}{2D_y}y - \frac{v_z}{2D_z}z\right].$$

Оскільки межові умови для рівняння (16) відрізняються від межових умов для рівняння (10) тільки різними значеннями коефіцієнтів дифузії ($D_x^* \to D_x$ тощо), характеристичні рівняння для визначення власних значень та власні функції мають однакову структуру.

Цю відмінність відобразимо, позначивши відповідні власні значення рискою ($\gamma_k \to \bar{\gamma}_k$ тощо).

Застосувавши метод скінчених інтегральних перетворень до рівняння (17) з початковою умовою (3) та межовими умовами (4)—(8), отримаємо розв'язок задачі у вигляді:

$$C_{pk}^{'}(x,y,z,t) = \sum_{k,lm}\sin\bar{\mu}_m x\left(\cos\bar{\beta}_{k,l}y + \frac{v_y}{2D_y\bar{\beta}_{k,l}}\sin\bar{\beta}_{k,l}y\right)\sin\bar{\gamma}_k z\cdot$$
$$\cdot\left\{B_{m,l,k} - C_{m,l,k}e^{-\bar{\delta}_{m,l,k}^2 t} + D_{m,l,k}e^{-\delta_{m,l,k}^2 t}\right\}. \tag{19}$$

Визначення коефіцієнтів виразів (15) та (19) здійснюється за відповідними алгоритмами і програмами мовою С.

Розв'язки (15),(19) надають можливість, по-перше, визначити межі змінювання вхідних параметрів процесів утворення концентрації розчиненого кисню та біохімічного вживання кисню біонтом, що присутня у водоймі, з метою визначення граничних концентрацій РК—БВК, за яких водойм вважається "живим", по-друге, визначити баланс РК—БВК, що забезпечує життєдіяльність водних організмів, а, отже, розробити систему контролю та управління екологічною системою очищення поверхневих водойм.

Література

1. Згуровский М.З., Скопецкий В.В. и др. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде.—К.: Наукова думка, 1997.— 364 с.
2. Зеленський К.Х., Ігнатенко В.М., Коц О.П. Комп'ютерні методи прикладної математики.—К.: Академперіодика, 2002.—480 с.
3. Зеленский К.Х., Игнатенко В.Н., Коц А.П. Комп'ютерные методы прикладной математики. Т.2. Реализация. —К.: Академперіодика, 2000.—280 с.

Получено 20.11.2007