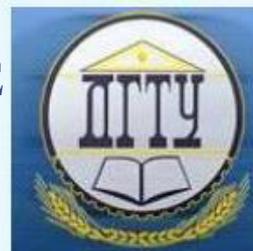


# МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ MATHEMATICAL MODELLING



УДК 519.6

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-7-4-47-53>

Научная статья



## Моделирование процесса распространения загрязнения водной экосистемы фосфатами

Т.В. Лященко<sup>1,2,3</sup> ✉, А.Е. Чистяков<sup>2</sup>, А.В. Никитина<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Таганрогский институт управления и экономики, г. Таганрог, Российская Федерация

<sup>2</sup>Донской государственный технический университет, г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация

<sup>3</sup>Институт компьютерных технологий и информационной безопасности Южного федерального университета, г. Таганрог, Российская Федерация

✉ [t.lyashchenko@tmei.ru](mailto:t.lyashchenko@tmei.ru)

### Аннотация

**Введение.** Загрязнение мелководных водоемов является очень серьезной проблемой. Для защиты и восстановления таких уязвимых экосистем крайне важно изучить механизмы распространения в них загрязнений, разработать стратегии по развитию устойчивого и экологически чистого использования природных ресурсов, минимизации негативного влияния на окружающую среду. Частью этой работы является построение математической модели распространения загрязнений (в частности, фосфатов) в мелких водоемах. Целью работы является построение сценариев изменения концентрации фосфатов при различных параметрах модели.

**Материалы и методы.** С помощью модифицированного попеременно-треугольного итерационного метода решения сеточных уравнений (МПТМ) создается математическая модель транспорта фосфатов в мелководном водоеме.

**Результаты исследования.** Разработанная математическая модель численно реализована в виде программного модуля. Эта модель представляет собой важный инструмент для оценки и прогнозирования воздействия различных источников загрязнения на качество вод экосистем, таких как море, озеро и водохранилище.

**Обсуждение и заключение.** Полученная модель может быть использована для анализа различных сценариев загрязнения, например, для определения оптимальных стратегий управления отходами и предотвращения загрязнения водных ресурсов. Кроме того, разработанный авторами программный модуль позволяет моделировать процесс изменения концентрации фосфатов и может быть полезен для проведения научных и инженерных исследований в области водной экологии и разработки эффективных методов адаптации гидробиоценоза к изменениям водной экосистемы.

**Ключевые слова:** математическая модель, загрязняющие вещества, фосфаты, мелководный водоем, алгоритм, программный модуль

**Финансирование.** Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-11-00295.

<https://rscf.ru/project/22-11-00295/>

**Для цитирования.** Лященко Т.В., Чистяков А.Е., Никитина А.В. Моделирование процесса распространения загрязнения фосфатами в водной экосистеме. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2023;7(4):47–53.

<https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-7-4-47-53>

Original article

## Pollutions Spreading Process Modelling in an Aquatic Ecosystem

Tatyana V. Lyashchenko<sup>1,2,3</sup> ✉, Alexander E. Chistyakov<sup>2</sup>, Alla V. Nikitina<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Taganrog Management and Economics Institute, Taganrog, Russian Federation

<sup>2</sup>Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russian Federation

<sup>3</sup>Institute of Computer Technology and Information Security of the Southern Federal University, Taganrog, Russian Federation

✉ [t.lyashchenko@tmei.ru](mailto:t.lyashchenko@tmei.ru)

### Abstract

**Introduction.** Pollution of shallow waters is becoming an increasingly serious problem. It is important to study the mechanisms of pollution distribution in them to protect and restore such vulnerable ecosystems, it is necessary to develop strategies for the development of sustainable and environmentally friendly use of natural resources, minimizing the

negative impact on the environment. Part of this work is the construction of a mathematical model for the spread of pollutants (in particular, phosphates) in shallow reservoirs. The aim of the work is to construct scenarios for changes in the concentration of phosphates at various parameters of the model.

**Materials and Methods.** The phosphate transport mathematical model in a shallow reservoir is described, implemented using a modified alternating triangular iterative method to solving grid equations.

**Results.** The developed mathematical model is numerically implemented in the form of a software module. This model is an important tool for assessing and predicting the various pollution sources impact to the water quality of ecosystems such as lakes and reservoirs.

**Discussion and Conclusion.** The resulting model can be used to analyze various pollution scenarios, for example, to determine optimal waste management strategies and prevent pollution of water resources. In addition, the software module developed by the authors allows you to simulate the process of the phosphates concentration changing and can be useful for conducting scientific and engineering research in the aquatic ecology field and developing effective methods for adapting hydrobiocenosis to changes in the aquatic ecosystem.

**Keywords:** mathematical model, pollutants, shallow water body, phosphates, algorithm, software module

**Funding information.** The study was supported by the Russian Science Foundation grant no. 22-11-00295. <https://rscf.ru/en/project/22-11-00295/>

**For citation.** Lyashchenko T.V., Chistyakov A.E., Nikitina A.V. Pollutions spreading process modelling in an aquatic ecosystem. *Computational Mathematics and Information Technologies*. 2023;7(4):47–53. <https://doi.org/10.23947/2587-8999-2023-7-4-47-53>

**Введение.** Мелководные водоемы являются уязвимыми экосистемами, подверженными воздействию различных источников загрязнения. Это становится все более серьезной проблемой, особенно для таких систем, как Азовское море, Цимлянское и Рыбинское водохранилища, небольшие озера и т. д. Загрязнение мелководных водоемов происходит за счет выбросов различных вредоносных, токсичных и недостаточно очищенных веществ, которые могут оказывать негативное воздействие на живые организмы и экосистемы водоемов. Отходы сельхозпроизводства, промышленности, транспорта становятся постоянными источниками загрязнения водных систем. Математическое моделирование позволяет более полно понять механизмы переноса загрязнений, изменение их концентраций и влияние на окружающую среду. Это, в свою очередь, поможет разработать эффективные меры по предотвращению и уменьшению загрязнения водоемов, а также оценить эффективность уже предпринятых действий.

Различные загрязняющие вещества имеют широкий спектр характерных для них свойств, отличаются также способы их транспортировки в водных системах. Некоторые вещества могут быть растворимы в воде и равномерно распределяются в ней, в то время как другие могут скапливаться в виде частиц или оседать на дно водоема. Это может вызывать неравномерное распределение загрязнений в водной среде и оказывать негативное воздействие на живые организмы. Также важно учитывать факторы, связанные с биологической активностью загрязнений. Некоторые вещества могут подвергаться биохимическому разложению, что влияет на их концентрацию и степень токсичности. Кроме того, загрязняющие вещества могут накапливаться в живых организмах, причиняя им значительный вред. Например, тяжелые металлы аккумулируются в тканях рыб и других водных организмов, что может приводить к нарушениям их жизнедеятельности и даже угрожать здоровью человека при употреблении такой рыбы и других гидробионтов в пищу. Для эффективного контроля и предотвращения загрязнения водоемов важно исследовать не только физико-химические свойства загрязняющих веществ, но и параметры окружающей водной среды, активность биологических процессов и экологические взаимодействия водных организмов.

Фосфаты представляют собой химические соединения, которые оказывают влияние на качество воды путем стимулирования чрезмерного роста синезеленых водорослей. Хотя все растения нуждаются в фосфатах для нормального роста, концентрация фосфора в поверхностных водах должна составлять всего 0,02 частей на миллион. Присутствие большой концентрации фосфатов делает воду мутной, она становится зеленого цвета, имеет низкое содержание кислорода. Избыточное количество фосфатов в воде питает водоросли, которые бесконтрольно разрастаются в водных экосистемах, при разложении вырабатывают вредные токсины и создают дисбаланс, который приводит к уничтожению других форм жизни. Во время цветения, а потом отмирания микроводорослей образуются продукты анаэробного распада, появляется сероводород и возникают заморы рыб. На рис. 1 а продемонстрировано опасное явление — «цветение вод» Таганрогского залива в летний период, вызванное попаданием в водоем биогенных веществ (соединений азота, фосфора, кремния) со стоками рек Дон, Кубань и др., а также путем оседания на поверхность водоема из воздуха. Рис. 1 б демонстрирует такое же явление в Цимлянском водохранилище, а на рис. 1 в видно, что даже на расположенном гораздо севернее Рыбинском водохранилище при невысокой температуре воздуха вода становится зеленой. Проблему «цветения» воды и перебоев с водоснабжением городов нельзя полностью решить только такими методами, как вселение хлореллы или толстолобика [1, 2]. Необходимо знать, где данных водорослей скопится наибольшее количество (в том числе и с целью удешевления методов борьбы с ними). Эту проблему можно решить на основе математического моделирования процесса рас-

пространения загрязняющих веществ, включая основные виды биогенов. К ним отнесем соединения фосфора, натрия и кремния. Модель строится в предположении, что уменьшение концентрации фосфатов происходит в том числе и за счет расхода на рост клеток фитопланктона.



Рис. 1. Водные экосистемы, подверженные опасному явлению — «цветению вод»: а — Таганрогский залив Азовского моря; б — Цимлянское водохранилище; в — Рыбинское водохранилище

Математическое моделирование транспорта загрязняющих веществ в водоемах представляет собой эффективный метод, используемый в экологических исследованиях. Этот подход позволяет более глубоко и систематически изучать процессы распространения загрязнений, предсказывать их потенциальные последствия, способствует разработке эффективных стратегий управления и защиты водных ресурсов [3, 4].

**Материалы и методы.** Математическая модель транспорта загрязняющих веществ (ЗВ), которая позволяет оценивать и прогнозировать влияние различных источников загрязнения на качество воды в мелководном водоеме, имеет вид:

$$\frac{\partial S_i}{\partial t} + u \frac{\partial S_i}{\partial x} + v \frac{\partial S_i}{\partial y} + (w - w_{gi}) \frac{\partial S_i}{\partial z} = \mu_i \Delta S_i + \frac{\partial}{\partial z} \left( \nu_i \frac{\partial S_i}{\partial z} \right) - (k_i + d_i) S_i + \psi_i(x, y, z, t), \quad (1)$$

где  $S_i$  — концентрация  $i$ -й примеси,  $i = \overline{1, 6}$ , причем 1 — общий органический азот ( $N$ ); 2 — фосфаты ( $PO_4$ ); 3 — фитопланктон; 4 — зоопланктон; 5 — растворенный кислород ( $O_2$ ); 6 — сероводород ( $H_2S$ );  $\mathbf{U} = (u, v, w)^T$  — вектор скорости водного потока;  $w_{gi}$  — скорость оседания;  $\mu_i, \nu_i$  — коэффициенты турбулентного обмена соответственно по горизонтальному и вертикальному направлениям;  $k_i$  — коэффициент растворимости для ЗВ, убыли — для кислорода и сероводорода, смертности — для гидробионта;  $d_i$  — коэффициент уменьшения ЗВ за счет поедания синезеленых водорослей (цианопрокариот), уменьшения за счет дыхания (для кислорода) и химических реакций (для кислорода и углекислого газа), коэффициент выедания гидробионтов представителями высших трофических уровней;  $\psi_i$  — химико-биологический источник (сток) [5].

К системе (1) добавляются начальные и граничные условия, учитывающие вид и концентрацию ЗВ, оседающих на поверхность водоема из воздушной среды.

Область решения задачи  $G$  представляет собой замкнутый бассейн, ограниченный невозмущенной поверхностью моря  $z = 0$ , дном  $H_0 = H_0(x, y)$  — глубиной до твердой поверхности водоема (без учета наносов). Граничные условия:

- на поверхности моря, при:  $z = -\xi(x, y, t)$ :  $S_i = \varphi_i(S_i)$ , где  $\varphi_i$  — известные функции;
- на дне океана при  $z = H(x, y)$  для скорости течения и прилипания:

$$u = 0, v = 0, w = 0, S_i = 0, \text{ если } \mathbf{U}_n > 0; \quad \frac{\partial S_i}{\partial \mathbf{n}} = 0, \text{ если } \mathbf{U}_n < 0; \quad \frac{\partial S_i}{\partial z} = -\varepsilon_i S_i,$$

где  $\mathbf{n}$  — вектор внешней нормали к поверхности,  $\varepsilon_i$  — коэффициент поглощения  $i$ -й компоненты донными отложениями.

В постановке начально-краевой задачи для системы достаточно задать начальные условия для функций  $u, v, w, S_i$ :

$$u(x, y, z, 0) = u_0(x, y, z); v(x, y, z, 0) = v_0(x, y, z); w(x, y, z, 0) = w_0(x, y, z); S_i = S_{i,0}, \quad i = \overline{1, 6}.$$

Исходная модель гидрофизики решается методом поправки к давлению, при этом система разбивается на две подзадачи: первая включает уравнения диффузии, вторая конвекции и неразрывности.

**Результаты исследования.** Рассмотрим дискретные аналоги операторов конвективного ( $uS'_x$ ) и диффузионного ( $\mu S'_x$ ) переносов для концентрации фосфатов  $S_2$ , которые могут быть записаны в следующем виде:

$$(q_0)_{i,j} u S'_x = (q_1)_{i,j} u_{i+1/2,j} \frac{S_{i+1,j} - S_{i,j}}{2h_x} + (q_2)_{i,j} u_{i-1/2,j} \frac{S_{i,j} - S_{i-1,j}}{2h_x}, \quad (2)$$

$$(q_0)_{i,j} (\mu S'_x)'_x = (q_1)_{i,j} \mu_{i+1/2,j} \frac{S_{i+1,j} - S_{i,j}}{h_x^2} - (q_2)_{i,j} \mu_{i-1/2,j} \frac{S_{i,j} - S_{i-1,j}}{h_x^2} - [(q_1)_{i,j} - (q_2)_{i,j}] \mu_{i,j} \frac{\alpha_x S_{i,j} + \beta_x}{h_x}, \quad (3)$$

где  $q_0, q_1, q_2$  — коэффициенты заполненности контрольных областей;  $\alpha, \beta$  — коэффициенты, стоящие в граничных условиях [6].

Для определения погрешности аппроксимации выражений (2), (3) доопределим расчетную область. Выражение (2) можно рассмотреть в случае  $(q_1)_{i,j} = (q_2)_{i,j} = 0$ , при этом будем утверждать, что погрешность аппроксимации полученного выражения равна погрешности исходного выражения. Для определения погрешности аппроксимации выражения (3) нужно рассмотреть два случая: первый случай не учитывает влияние границы  $(q_1)_{i,j} = (q_2)_{i,j} = 1$ , второй — учитывает  $(q_1)_{i,j} = 1; (q_2)_{i,j} = 0$ , т. к. аппроксимация (3) может быть записана через линейную комбинацию аппроксимаций, полученных в описанных ранее двух случаях. Таким образом, для определения погрешностей достаточно исследовать точность следующих аппроксимаций:

– дискретный аналог оператора конвективного переноса в случае отсутствия влияния границы области

$$u S'_x = u_{i+1/2,j} \frac{S_{i+1,j} - S_{i,j}}{2h_x} + u_{i-1/2,j} \frac{S_{i,j} - S_{i-1,j}}{2h_x}, \quad (4)$$

– дискретный аналог оператора диффузионного переноса в случае отсутствия влияния границы области

$$(\mu S'_x)'_x = \mu_{i+1/2,j} \frac{S_{i+1,j} - S_{i,j}}{h_x^2} - \mu_{i-1/2,j} \frac{S_{i,j} - S_{i-1,j}}{h_x^2}. \quad (5)$$

Для нахождения погрешности аппроксимации выражения (4) необходимо воспользоваться разложением в ряд Тейлора относительно узла  $(i, j)$  значений функций в узлах  $(i + 1, j)$  и  $(i - 1, j)$ :

$$S_{i+1,j} = S_{i,j} + (S_{i,j})' h_x + (S_{i,j})'' \frac{h_x^2}{2} + O(h_x^3),$$

$$S_{i-1,j} = S_{i,j} - (S_{i,j})' h_x + (S_{i,j})'' \frac{h_x^2}{2} + O(h_x^3).$$

С учетом аппроксимации (4) запишем как

$$u \overline{S'_x} = \frac{u_{i+1/2,j} + u_{i-1/2,j}}{2} (S_{i,j})' + \frac{u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j}}{4} (S_{i,j})'' h_x + O(h_x^2).$$

Принимая во внимание выражение

$$u_{i+1/2,j} + u_{i-1/2,j} = 2u_{i,j} + O(h_x^2), \quad u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j} = O(h_x),$$

установим, что дискретный аналог оператора конвективного переноса примет вид

$$u_{i+1/2,j} \frac{S_{i+1,j} - S_{i,j}}{2h_x} + u_{i-1/2,j} \frac{S_{i,j} - S_{i-1,j}}{2h_x} = u_{i,j} (S_{i,j})' + O(h_x^2).$$

Для нахождения погрешности аппроксимации выражения (5) воспользуемся разложением в ряд Тейлора в узле  $(i, j)$  расчетной функции  $S$  в узлах  $(i + 1, j)$  и  $(i - 1, j)$  [7, 8]:

$$S_{i+1,j} = S_{i,j} + (S_{i,j})' h_x + (S_{i,j})'' \frac{h_x^2}{2} + O(h_x^3),$$

$$S_{i-1,j} = S_{i,j} - (S_{i,j})' h_x + (S_{i,j})'' \frac{h_x^2}{2} + O(h_x^3).$$

С учетом аппроксимации (5) запишется в виде:

$$(\mu S'_x)'_x = \frac{\mu_{i+1/2,j} - \mu_{i-1/2,j}}{h_x} (S_{i,j})' + \frac{\mu_{i+1/2,j} + \mu_{i-1/2,j}}{2} (S_{i,j})'' + (\mu_{i+1/2,j} - \mu_{i-1/2,j}) (S_{i,j})''' \frac{h_x}{6} + O(h_x^2).$$

Принимая во внимание выражения:

$$\mu_{i+1/2,j} + \mu_{i-1/2,j} = 2\mu_{i,j} + O(h_x^2),$$

$$\mu_{i+1/2,j} - \mu_{i-1/2,j} = (\mu_{i,j})' h_x + O(h_x^2),$$

получим, что дискретный аналог оператора диффузионного переноса в случае отсутствия влияния границы области примет вид [5]:

$$\mu_{i+1/2,j} \frac{S_{i+1,j} - S_{i,j}}{h_x^2} - \mu_{i-1/2,j} \frac{S_{i+1,j} - S_{i-1,j}}{h_x^2} = \left( \mu_{i,j} (S_{i,j})' \right)' + O(h_x^3).$$

Для вычисления относительной погрешности решения использовалась формула [8]:

$$\delta S = \frac{\Delta S}{|S|} = \frac{\sum_1^N \left| \frac{\partial S(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial x_i} \right| \Delta x_i}{|S(x_1, x_2, \dots, x_N)|} = \sum_1^N \left| \frac{\partial (\ln S(x_1, x_2, \dots, x_N))}{\partial x_i} \right| x_i \delta x_i.$$

Минимальная относительная погрешность принимает значение 0,002 при оптимальном шаге по времени 0,001. В ходе исследования рассмотрены различные оценки погрешности схемы для решения уравнения распространения ЗВ, проведена оптимизация шага по времени.

Рассмотрим следующий сценарий: конвективный перенос практически отсутствует. Постоянная равномерная функция источника загрязнения на поверхности области. Вид примеси: тяжелая равномерная; источник загрязнения  $f = 10$ . На рис. 2 представлено изменение концентрации фосфатов с коэффициентом убывания  $d = 1$  в вертикальном срезе на основе численного эксперимента с разработанным программным модулем.

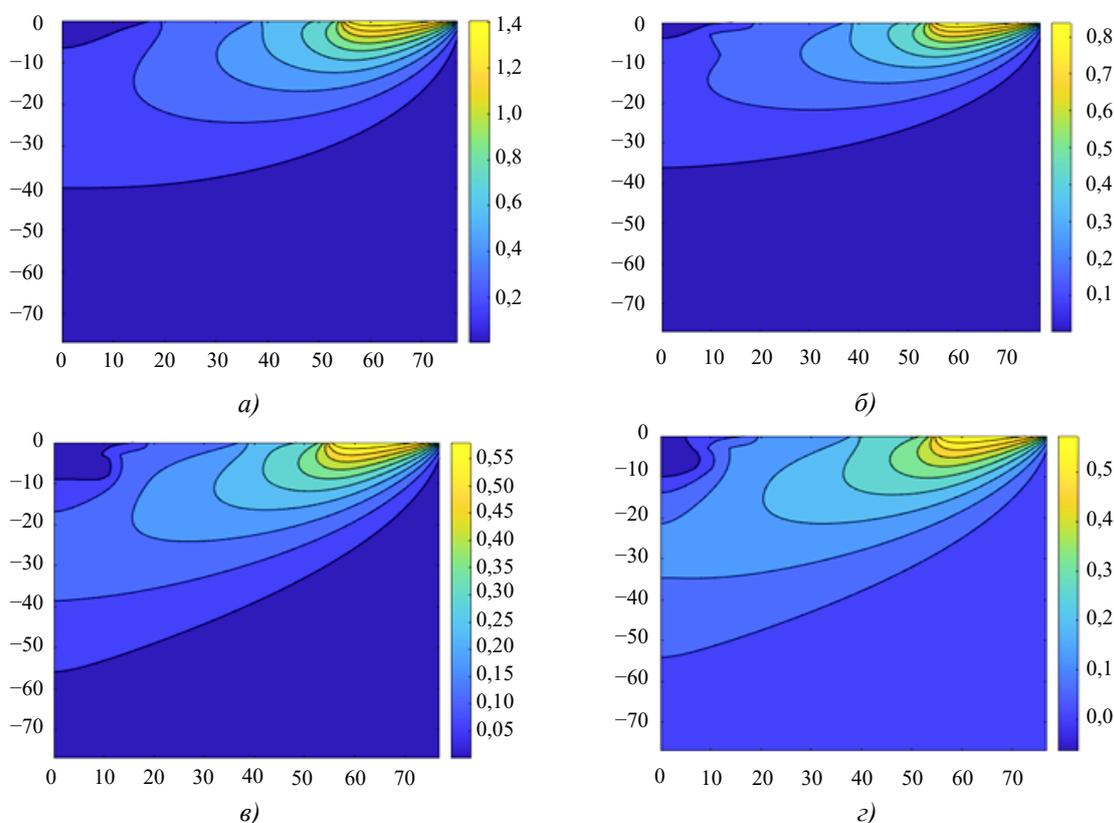


Рис. 2. Распределение концентрации ЗВ: а — время  $t = 5$ , значения коэффициентов:  $\mu = 0,005$ ,  $\nu = 0,1$ ,  $d = 1$ ; б — время  $t = 20$ , значения коэффициентов:  $\mu = 0,01$ ,  $\nu = 0,1$ ,  $d = 1$ ; в — время  $t = 60$ , значения коэффициентов:  $\mu = 0,005$ ,  $\nu = 0,1$ ,  $d = 1$ ; г — время  $t = 100$ , значения коэффициентов:  $\mu = 0,01$ ,  $\nu = 0,1$ ,  $d = 1$

Предложенная модель позволяет изучать процессы распространения различных типов загрязняющих веществ с поверхности водоема с учетом их растворения и оседания на дно. Приведены результаты расчетов распространения загрязнений с различными скоростями течения, коэффициентами диффузии, интенсивностью загрязняющих стоков и коэффициентов растворимости различных фосфатов. Проведен сравнительный анализ полученных результатов, показавший, что разработанная модель адекватно отображает процесс транспорта ЗВ. В численных экспериментах использовался разработанный программный модуль, который реализует алгоритм для математической модели растекания и растворения фосфатов с разными коэффициентами растворимости. Этот модуль позволяет прогнозировать и визуализировать процесс транспорта загрязняющих веществ в водных экосистемах.

**Обсуждение и заключение.** Для решения полученной в процессе дискретизации задачи транспорта ЗВ в мелководном водоеме использован адаптивный модифицированный попеременно-треугольный итерационный метод. Для повышения точности расчетов разработаны схемы повышенного порядка точности, которые



**Никитина Алла Валерьевна**, профессор кафедры программного обеспечения вычислительной техники и автоматизированных систем, Донской государственной технической университет (РФ, 344000, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), доктор технических наук, [ORCID](#), [MathSciNet](#), [ScopusID](#), [nikitina.vm@gmail.com](mailto:nikitina.vm@gmail.com)

*Заявленный вклад соавторов:*

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

*Конфликт интересов*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

*Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.*

**Received** 20.10.2023

**Revised** 27.11.2023

**Accepted** 04.12.2023

*About the Authors:*

**Tatyana V. Lyashchenko**, Senior Lecturer of the Department of Economics and Finance, Taganrog Institute of Management and Economics (45, Petrovskaya St., Taganrog, 347900, RF), [ORCID](#), [t.lyashchenko@tmei.ru](mailto:t.lyashchenko@tmei.ru)

**Alexander E. Chistyakov**, Professor of the Department of Computer Science and Automated Systems Software, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344000, RF), Doctor of Physical and Mathematical Sciences, [ORCID](#), [MathSciNet](#), [ScopusID](#), [cheese\\_05@mail.ru](mailto:cheese_05@mail.ru)

**Alla V. Nikitina**, Professor of the Department of Computer Science and Automated Systems Software, Don State Technical University (1, Gagarin Sq., Rostov-on-Don, 344000, RF), Doctor of Technical Sciences, [ORCID](#), [MathSciNet](#), [ScopusID](#), [nikitina.vm@gmail.com](mailto:nikitina.vm@gmail.com)

*Claimed contributor-ship:*

All authors have made an equivalent contribution to the preparation of the publication.

*Conflict of interest statement*

The authors do not have any conflict of interest.

*All authors have read and approved the final manuscript.*