

Khảo sát ô nhiễm trên môi trường nước

Nguyễn Tường Duy Bảo[†], Nguyễn Khánh Duy[‡], Nguyễn Lý Nhật Quỳnh[§]

.....
Phương trình đôi lưu khuếch tán được ứng dụng rất nhiều trong các bài toán về ô nhiễm môi trường nước. Bằng cách kết hợp phương trình này cùng với các định luật vật lý và toán học, ta có thể thiết lập được hàm số về nồng độ chất thải ô nhiễm trên sông. Bài viết này tập trung vào việc xây dựng mô hình để ước tính nồng độ chất thải và qua đó xác định được nguyên nhân chính gây ra ô nhiễm.

Từ khóa: Phương trình khuếch tán đôi lưu, ô nhiễm môi trường nước.

	Contents	PAGE
1	Lời cảm ơn	2
2	Giới thiệu	2
3	Đặt vấn đề	2
	3.1 Các số liệu :	2
	3.2 Các giả sử	2
4	Mô hình hoá	3
	4.1 Thiết lập mô hình	3
	4.2 Giải quyết bài toán:	5
	4.3 Xác định nguyên nhân chính gây ra ô nhiễm	8
	4.4 Mô phỏng mô hình	8
5	Nhận xét đánh giá	9
6	Mở rộng vấn đề	10
7	Phụ lục	11
8	Nguồn tham khảo	13

[†]Trường THPT chuyên Lê Quý Đôn Đà Nẵng

[‡]Trường THPT Nguyễn Hữu Cầu TPHCM

[§]Trường Phổ Thông Năng Khiêu TPHCM

1. Lời cảm ơn

Chúng em xin chân thành cảm ơn PGS.TSKH Bùi Tá Long đã có một buổi giao lưu thật bổ ích, từ đó truyền cho nhóm chúng em nguồn cảm hứng để thực hiện đề tài này. Xin cảm ơn anh Trần Thành Trung- người sáng lập ra PIMA- đã cho chúng em một trải nghiệm thật bổ ích và lý thú, nhờ PIMA chúng em đã trưởng thành hơn rất nhiều. Nhóm cũng xin cảm ơn hai mentor chính của nhóm: anh Phạm Hoàng Nhật và anh Đỗ Hoàng Gia Phú đã giúp đỡ rất nhiệt tình chúng em trong suốt ba ngày dài làm dự án. Cuối cùng, chúng em xin cảm ơn các anh chị mentor khác trong BTC cũng đã ân cần giúp đỡ chúng em trong suốt khoảng thời gian vừa qua.

2. Giới thiệu

Nước ta đang trên đà công nghiệp hóa, hiện đại hóa. Vì vậy, việc phát triển công nghiệp đang được tập trung chú trọng. Tuy nhiên với đà phát triển như vậy, những vấn đề môi trường đang được đặt ra và cần được giải quyết. Các nhà máy, xí nghiệp đang mọc lên ngày càng nhiều. Vì lợi nhuận cá nhân, rất nhiều nhà máy đã bỏ qua các quy trình xử lý nước thải quy chuẩn và trực tiếp xả thải ra môi trường. Hệ quả là các con sông ngày càng ô nhiễm, đời sông, sức khỏe của người dân ngày càng hiểm nguy. Một ví dụ điển hình là trường hợp ô nhiễm của sông Thị Vải năm 2008. Theo các nhà khoa học môi trường Đại học Quốc gia TP HCM thì 2000ha sông đang bị ô nhiễm nặng và gần 700ha sông bị ô nhiễm nhẹ. Và hơn nữa quá trình điều tra chứng minh được công ty Vedan gây nên 90% ô nhiễm. Nhóm tạo ra mô hình nhằm giải quyết các vấn đề tương tự trong thực tế. Mô hình của nhóm ưu tiên sự đối lưu, sự khuếch tán và nhiệt độ của môi trường để ước tính nồng độ ô nhiễm. Ngoài việc ước tính nồng độ trên mô hình một con sông, nhóm còn cố gắng phát triển mở rộng mô hình nhiều sông giao nhau. Sau khi hoàn thành mô hình, nhóm phân tích ưu nhược điểm của mô hình để từ đó tìm ra mô hình tối ưu.

3. Đặt vấn đề

3.1. Các số liệu :

Cho một lưu vực sông có n nhà máy.

Cho biết :

- Chiều rộng của sông $r(m)$
- Vận tốc dòng chảy $v(m/s)$
- Nhiệt độ môi trường nước $T(K)$
- Vị trí của các nhà máy

Thiết lập mô hình xác định :

- (1) Nồng độ ô nhiễm từng khu vực tại các thời điểm khác nhau
- (2) Xác định được nguyên nhân chính của nguồn ô nhiễm

3.2. Các giả sử

- (1) Nhiệt độ tại mọi điểm trên sông tại các thời điểm là như nhau.
- (2) Vận tốc dòng chảy là như nhau tại mọi điểm.
- (3) Các nhà máy xả thải cùng một loại chất thải.
- (4) Nồng độ chất thải tại mỗi lần xả là như nhau của mỗi nhà máy.
- (5) Ngoài các yếu tố đã nêu trên, ta tạm thời bỏ qua các yếu tố ngoại lực khác.

4. Mô hình hoá

4.1. Thiết lập mô hình

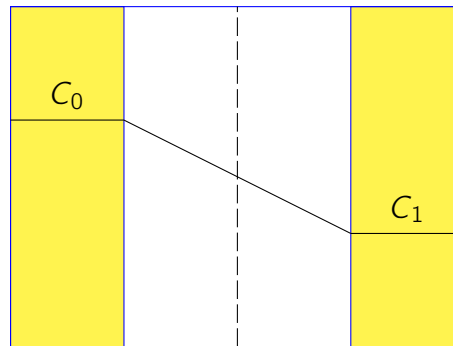
(1) Phương trình khuếch tán

Khuếch tán là sự dao động nhiệt của tất cả các phân tử (chất lỏng hay chất khí ở nhiệt độ lớn hơn độ không tuyệt đối). Sự khuếch tán dẫn đến sự dịch chuyển các phân tử từ một khu vực có nồng độ cao hơn đến khu vực có nồng độ thấp hơn, nhưng khuếch tán cũng xảy ra khi không có gradient nồng độ)

* **Xét không gian 1D** : Đặt hệ trục tọa độ có gốc tọa độ tại điểm xả thải. Ta gọi dòng chất thải liên tiếp cách nhau một khoảng Δt nhất định. Dẫn đến Δt càng nhỏ thì tốc độ xả thải càng nhanh.

Tiếp theo ta thiết lập phương trình khuếch tán của từng khối chất thải. Đặt $C(x, t)$ là nồng độ chất thải của tọa độ x tại thời điểm t (đơn vị kq/m^3); $q(x, t)$ là khối lượng chất đi qua một đơn vị diện tích mặt cắt trong một đơn vị thời gian (đơn vị $kq/m^2.s$)

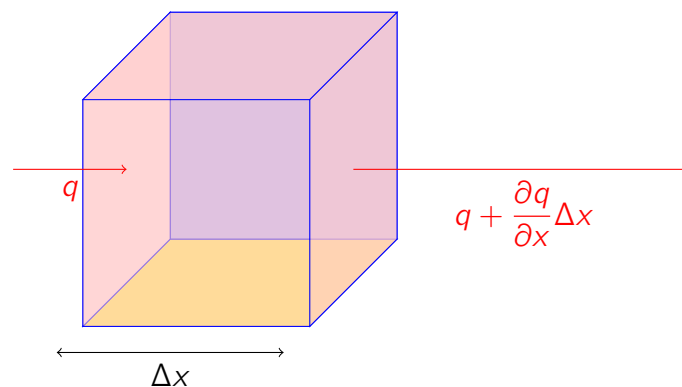
- Định luật Fick : Khối lượng chất đi qua một đơn vị diện tích trong một đơn vị thời gian theo phương cho trước thì tỉ lệ với gradient của nồng độ chất theo phương đó



$$q = -D \frac{\partial C}{\partial x}$$

D: hệ số tỉ lệ (m^2/s)

Xét một thể tích kiểm soát



Xem diện tích mặt cắt là 1 đvdt

Tổng khối lượng trong một thể tích kiểm soát:

$$C(x, t) \cdot \Delta x \cdot 1$$

Dẫn đến tốc độ thay đổi chất trong một thể tích kiểm soát:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \cdot \Delta x$$

Xét trong một đơn vị diện tích :

- Khối lượng chất qua mặt cắt tại x : $q(x, t)$
- Khối lượng chất qua mặt cắt tại $x + \Delta x$: $q(x + \Delta x, t)$

$$q(x + \Delta x, t) = q(x, t) + \frac{\partial q}{\partial x} \cdot \Delta x$$

- Suy ra độ chênh lệch chất khi đi qua mặt phẳng tại x và $x + \Delta x$:

$$\frac{\partial q}{\partial x} \cdot \Delta x$$

- Điều kiện bảo toàn khối lượng vật chất trong thể tích kiểm soát:

$$\frac{\partial q}{\partial x} \cdot \Delta x = -\frac{\partial C}{\partial t} \cdot \Delta x \quad (1)$$

Kết hợp với định luật Fick:

$$\Rightarrow \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial x} = D \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right) = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

* **Mở rộng ra 2D :**

Hoàn toàn tương tự trường hợp 1D, ta có:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right)$$

(2) Phương trình khuếch tán đối lưu :

Đối lưu là sự di chuyển của những nhóm phân tử trong chất lưu như chất lỏng, chất khí hay chất lưu biến

Giả sử chất lỏng di chuyển với các thành phần vận tốc theo phương x, y lần lượt là u, v .

* **Xét không gian 1D :**

Sự đối lưu và khuếch tán có **tính độc lập** và **tính cộng**: *Quá trình khuếch tán được cho là một quá trình ngẫu nhiên dựa vào sự dao động của các phân tử. Dựa vào quá trình khuếch tán, mỗi phân tử trong khoảng thời gian Δt sẽ dịch chuyển một bước về phía bên trái hoặc bên phải. Dựa vào quá trình đối lưu, mỗi phân tử cũng sẽ dịch chuyển một đoạn $\pm u\Delta t$ theo hướng của dòng chảy. Ta nhận thấy sự xuất hiện của dòng chảy không làm thay đổi xác suất mỗi phân tử sẽ dịch chuyển qua trái hay qua phải, yếu tố đó chỉ cộng thêm vào cho mỗi bước. Vậy mỗi phân tử sẽ di chuyển một đoạn $u\Delta t \pm \Delta x$.*

Suy ra khối lượng chất đi qua 1 đơn vị diện tích trong một đơn vị thời gian là :

$$q = uC - D \frac{\partial C}{\partial x}$$

Chúng minh tương tự phương trình (1) ta được :

$$\begin{aligned} \frac{\partial q}{\partial x} \cdot \Delta x &= -\frac{\partial C}{\partial t} \cdot \Delta x \\ \frac{\partial C}{\partial t} &= -\frac{\partial q}{\partial x} \\ \frac{\partial C}{\partial t} &= -D \frac{\partial}{\partial x} \left(uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial C}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} \end{aligned}$$

* **Mở rộng cho không gian 2D:**

(Gốc tọa độ đặt tại điểm xả thải)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) \quad (*)$$

với $C(x, y, t)$ là nồng độ tại tọa độ (x, y) thời điểm t

(3) **Phương trình khuếch tán đối lưu và sự ảnh hưởng của nhiệt độ :**

Ở mục 1 và 2 ta xem hệ số khuếch tán D là hằng số. Nhưng rõ ràng ở mỗi nhiệt độ t° của môi trường khác nhau thì hệ số khuếch tán D là khác nhau. Theo phương trình Stokes-Einstein thì hệ số khuếch tán D tỉ lệ thuận với nhiệt độ tuyệt đối $T(^{\circ}K)$. Do vậy ta có thể xem D là một hàm số theo $T.f(T)$.

Cụ thể:

$$D = \frac{k_B}{6\pi\eta r} T = k_A T$$

Trong đó :

η : độ nhớt động lực

r : bán kính phân tử trong chất thải

k_B : hằng số Boltzmann's

$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} J/K$

Theo giả sử của bài toán, ta có thể xem $k_A = \frac{k_B}{6\pi\eta r}$ là một hằng số.

Ngoài ra hệ số khuếch tán cũng bị ảnh hưởng bởi môi trường chất lỏng bên ngoài nên ta cũng có thể nhân k_A với một hệ số đặc trưng cho môi trường chất lỏng đó (ta tạm thời bỏ qua yếu tố này trong phạm vi bài toán)

4.2. *Giải quyết bài toán:*

Ta sử dụng **phương pháp sai phân hữu hạn** để giải quyết bài toán. Trước tiên ta sẽ chứng minh:

$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \simeq f'(x)$$

Áp dụng khai triển Taylor ta có :

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x) - f(x) &= f'(x)\Delta x + \frac{f''(x)}{2!}\Delta x^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!}\Delta x^n \quad (1) \\ &= f'(x)\Delta x + o(\Delta x^2) \\ \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} &= f'(x) + o(\Delta x) \\ &\simeq f'(x) \quad (I) \end{aligned}$$

(Δx đủ nhỏ)

Tương tự, nếu ta thay Δx bằng $-\Delta x$ vào phương trình (1):

$$f(x - \Delta x) - f(x) = -f'(x)\Delta x + \frac{f''(x)}{2!}\Delta x^2 + \dots + (-1)^n \frac{f^{(n)}(x)}{n!}\Delta x^n \quad (2)$$

Cộng hai vế của phương trình (1),(2) ta được:

$$\begin{aligned} f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x) - 2f(x) &= f''(x)\Delta x^2 + o(\Delta x^4) \\ \frac{f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x) - 2f(x)}{\Delta x^2} &\simeq f''(x) \quad (II) \end{aligned}$$

Trong bài toán đặt ra, ta sẽ rời rạc hoá các điểm trên trục Ox thành các điểm $i\Delta x$ với $i = 1, 2, 3, \dots, n$

Tương tự ta cũng rời rạc hoá các điểm trên trục Oy thành các điểm $j\Delta y$ và thời gian thành các điểm $n\Delta t$.

Khi đó ta kí hiệu :

$$C(x, y, t) = C_{i,j}^n \quad (III)$$

Dựa vào phương trình (I),(II),(III) ta viết lại phương trình (*):

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j}^n}{\Delta t} &= D \left(\frac{C_{i+1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j+1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \\ &\quad - u \left(\frac{C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n}{\Delta x} \right) - v \left(\frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n}{\Delta y} \right) \end{aligned}$$

hay

$$\begin{aligned} C_{i,j}^{n+1} &= C_{i,j}^n + D\Delta t \left(\frac{C_{i+1,j}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j+1}^n - 2C_{i,j}^n + C_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) \\ &\quad - u\Delta t \left(\frac{C_{i+1,j}^n - C_{i,j}^n}{\Delta x} \right) - v\Delta t \left(\frac{C_{i,j+1}^n - C_{i,j}^n}{\Delta y} \right) \end{aligned}$$

Trên thực tế nhà máy xả thải liên tục, như đã nói ta có thể xem các lần xả thải cách nhau một khoảng thời gian Δt nhất định. Do đó ta có thể xem $C_{i,j}^0 = m$ (với m là nồng độ chất thải trong một lần xả).

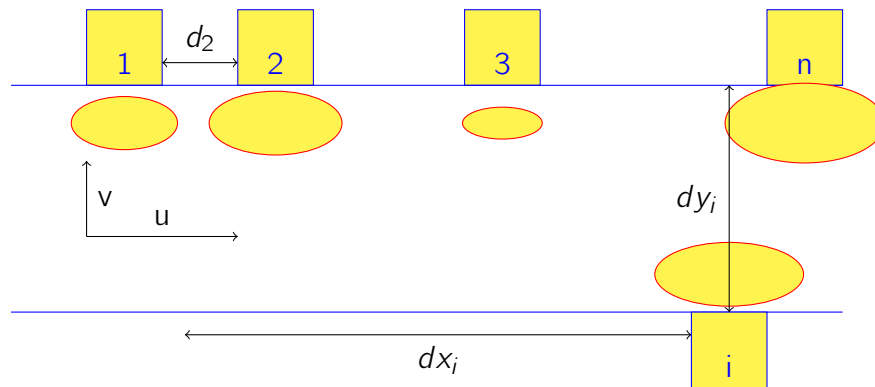
(1) **Mô hình xả thải của một nhà máy :**

Gọi m là nồng độ xả thải trong một lần của nhà máy. Như đã trình bày ở phần trên ta xét giá trị của hàm số C tại các điểm rời rạc C_{ij}^n với quy ước rằng $C_{0,0}^n = m$, và $C_{i,j}^0 = 0$ với $i, j \neq 0$, $C_{0,j}^n = 0$ với $j \neq 0$, $C_{i,0}^n = 0$ với $i \neq 0$. Như vậy nồng độ chất thải tại toạ độ $(i\Delta x, j\Delta y)$ tại thời điểm $n\Delta t$ là

$$C_{ij}^{n+1} = C_{ij}^n + D\Delta t \left(\frac{C_{i+1,j}^n - 2C_{ij}^n + C_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{i,j+1}^n - 2C_{ij}^n + C_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right) - u\Delta t \left(\frac{C_{i+1,j}^n - C_{ij}^n}{\Delta x} \right) - v\Delta t \left(\frac{C_{i,j+1}^n - C_{ij}^n}{\Delta y} \right)$$

Trên thực tế, nồng độ chất thải có thể bị bão hoà. Gọi l là mức bão hoà của nồng độ chất thải, khi đó nếu tồn tại n, i, j sao cho $C_{ij}^n \geq l$ thì ta lấy $C_{ij}^n = l$.

(2) **Mở rộng mô hình cho n nhà máy :**



Giả sử có n nhà máy trên sông xả thải cùng một lúc. Trong phần này ta chỉ xét nồng độ trên sông trong lúc tất cả các nhà máy đang còn xả thải.

Đặt gốc toạ độ tại $O(0, 0)$ tại nhà máy thứ nhất. Vận tốc theo phương x, y là u, v như hình vẽ. Toạ độ của nhà máy i là (dx_i, dy_i) . Thời gian Δt_i là thời gian cách nhau giữa 2 lần xả của nhà máy i , nồng độ xả thải ban đầu của nhà máy $i = m_i$ như hình vẽ.

Gọi nồng độ chất thải của nhà máy thứ i là $C_i(x, y, t)$ theo hệ toạ độ đã chọn. Tương tự mục trên, nhưng thay vì hệ trục toạ độ tại điểm xả của nhà máy thì bây giờ gốc toạ độ được tịnh tiến theo vector (dx_i, dy_i) . Nếu ta xét nồng độ chất thải tại thời điểm t kể từ lúc nhà máy xả thải thì $C_i(x, y, t) = C_i^{t_i}(i, j)$ (Ta chọn $t_i = [\frac{t}{\Delta t_i}]$: phần nguyên) Do vậy :

$$C_i(x, y, t) = C_i'(x + dx_i, y + dy_i, t)$$

Với C_i' là nồng độ chất thải của nhà máy i được tính như mục 1.

Như vậy nồng độ ô nhiễm trên sông do n nhà máy gây ra là :

$$S(x, y, t) = \sum_{i=1}^n C_i(x, y, t)$$

hay

$$S_{i,j}^{[t]} = \sum_{i=1}^n C_i(i, j, t_i)$$

(Với $[x]$ là phần nguyên của x)

Nếu tồn tại n, i, j sao cho $S_{i,j}^n \geq l$ thì ta lấy $S_{i,j}^n = l$.

4.3. Xác định nguyên nhân chính gây ra ô nhiễm

Trong bài toán có nhiều nhà máy gây ra ô nhiễm trên sông, qua cách giải quyết như đã nói trong phần 3.2 ta đã biết được khu vực bị ô nhiễm nhất của con sông qua giá trị của hàm S , đồng thời ta cũng biết được giá trị nồng độ ô nhiễm do từng nhà máy đóng góp qua giá trị của hàm C tại khu vực đó. Khi đó ta xác định được mức gây ra ô nhiễm của từng nhà máy qua giá trị:

$$P_i = \frac{C_i}{S}$$

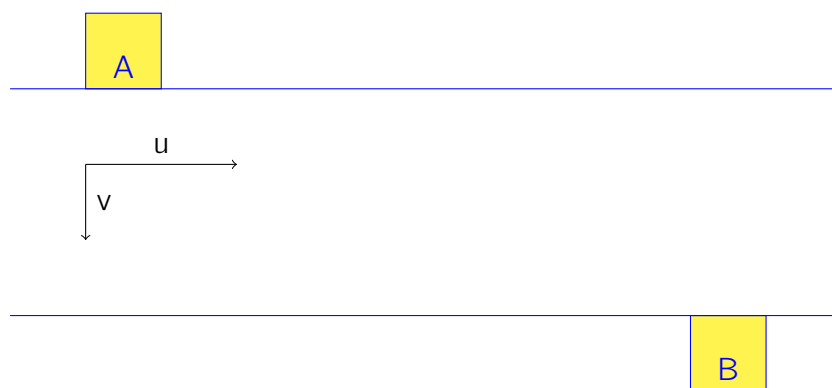
Với P_i là hàm số đặc trưng cho mức độ gây ra ô nhiễm của nhà máy i tại một khu vực nhất định.

Giá trị của P_i càng lớn thì mức độ gây ra ô nhiễm của nhà máy i càng cao.

4.4. Mô phỏng mô hình

Bảng 1: Hiện trạng các nguồn ô nhiễm đổ vào sông X

STT	Nguồn xả thải	Nồng độ ($\frac{kg}{m^3}$)
1	Khu công nghiệp gang thép A	0.56
2	Nhà máy giấy B	0.35



Giả sử A và B xả thải cùng thời điểm. Đặt hệ trục tọa độ Oxy tại nhà máy A có phương trùng với vận vector vận tốc u, v của dòng sông. Tọa độ điểm B(10,5). Ta chọn $\Delta x = \Delta y = 0.1$. Khoảng cách giữa 2 lần xả thải của A, B là $\Delta t = 0.1s$. Hằng số khuếch tán $D = 10^{-10}$. Khi đó áp dụng 4.2 ta sẽ tính được nồng độ chất thải của dòng sông tại thời điểm $n\Delta t$

5. Nhận xét đánh giá

Ưu điểm:

- (1) Xác định khá chính xác nồng độ chất ô nhiễm trong không gian 2D.
- (2) Xác định được thủ phạm chính gây ra ô nhiễm.
- (3) Mô hình có thể mở rộng ra được nhiều trường hợp.

Nhược điểm:

- (1) Vì mô hình bỏ qua một số yếu tố ngoại lực như lực đẩy của gió, vi sinh vật có khả năng làm sạch nước hay các nguồn thải sinh hoạt của con người nên mô hình cho kết quả không hoàn toàn chính xác.
- (2) Vì rời rạc hóa các phương của hệ tọa độ nên mô hình nên mất đi phần nào mối quan hệ giữa các phương.

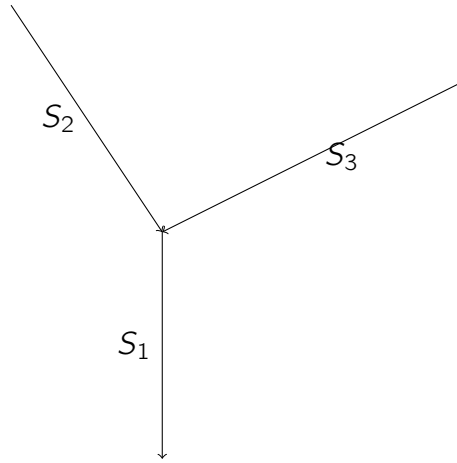
Cách khắc phục:

- (1) Vì một số vi sinh vật trong nước có khả năng làm sạch nước bằng cách oxy hóa chất thải (ví dụ vi sinh vật khử amoni có khả năng biến NH_4^+ thành khí N_2 , làm nồng độ chất thải giảm đi k lần. Vì vậy ta có thể lấy nồng độ chất thải chia đi với k để con số chính xác hơn.
- (2) Ta cũng có thể lấy Δx , Δy , Δt rất nhỏ để tính chính xác được cao hơn.
- (3) Ngoài ra cũng có thể bổ sung các yếu tố ngoại cảnh khác. Ví dụ vận tốc của gió có thể làm thay đổi vận tốc u , v của dòng nước, ta có thể cộng vector vận tốc gió với vector vận tốc của dòng chảy để tạo thành vector tổng mới.

6. Mở rộng vấn đề

Trong các phần trên, ta chỉ xét mô hình trên một con sông. Trong mục này ta sẽ xây dựng mô hình trên nhiều nhánh sông đổ ra cùng một con sông.

Ta xét các con sông như sau :



Trong đó chiều của các con sông chảy như hình vẽ và tất cả con sông đều đổ về S_1 . Giả sử các nhà máy trên trong hệ sông như hình vẽ có thời gian bắt đầu xả thải là như nhau.

Ta tính được nồng độ ô nhiễm trên sông m qua giá trị của hàm số S_m là tổng chất thải trên sông m với $m=2,3$. Ta tính được nồng độ chất thải trung bình tại điểm cuối cùng của sông S_2 theo công thức :

$$\overline{S_{2(i_2,j)}^n} = \frac{\sum_{j=0}^{k_2} S_{(i_2,j)}^n}{k_2}$$

Với chiều rộng của sông là $k_2\Delta y$ và toạ độ theo phương x tại điểm giao với sông S_1 là $i_2\Delta x$

Giá trị trên chính là nồng độ chất thải trung bình của đầu sông S_1 (cuối sông S_2) do sông S_2 góp vào tại thời điểm $n\Delta t$. Tương tự ta cũng tính được:

$$\overline{S_{3(i_3,j)}^n} = \frac{\sum_{j=0}^{k_3} S_{(i_3,j)}^n}{k_3}$$

Trong đó $\overline{S_m^n(i_m,j)}$ là nồng độ chất thải trung bình tại điểm cuối cùng của sông S_m . Đặt $C_1^n = \overline{S_{2(i_2,j)}^n} + \overline{S_{3(i_3,j)}^n}$. Ta có thể coi giá trị này như là nồng độ chất thải trong một lần xả thải của nhà máy thứ 1 (nhà máy ảo) đặt đầu sông S_1 tại thời điểm $n\Delta t$. Bài toán trở về việc xét nồng độ chất thải trên sông S_1 . Giả sử sông S_1 có m nhà máy. Ta đặt hệ trục toạ độ tại nhà máy 1 như hình vẽ. Dựa vào mục 4.2 ta tính được nồng độ chất thải của sông S_1 , tuy nhiên giá trị n của hàm $S_{i,j}^n$ được tính theo thời gian kể từ lúc các nhà máy bắt đầu xả thải (tức là lấy thời gian này làm mốc), còn i, j được tính theo hệ trục độ mới.

7. Phụ lục

(1) Giải phương trình vi phân bằng Python

Tương tự mục 3.2.1 ta được mô hình xả thải của một nhà máy là :

$$C_{ij}^{n+1} = C_{ij}^n + D\Delta t \left(\frac{C_{i+1j}^n - 2C_{ij}^n + C_{i-1j}^n}{\Delta x^2} + \frac{C_{ij+1}^n - 2C_{ij}^n + C_{ij-1}^n}{\Delta y^2} \right) - u\Delta t \left(\frac{C_{i+1j}^n - C_{ij}^n}{\Delta x} \right) - v\Delta t \left(\frac{C_{ij+1}^n - C_{ij}^n}{\Delta y} \right)$$

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
#plate size
w = h = 20.
# intervals in x-, y- directions , mm
dx = dy = 0.1
D = 4.

Tcool, Thot = 300, 700

nx, ny = int(w/dx), int(h/dy)

dx2, dy2 = dx*dx, dy*dy
dt = dx2 * dy2 / (2 * D * (dx2 + dy2))

u0 = Tcool * np.ones((nx, ny))
u = np.empty((nx, ny))

# Initial conditions – ring of inner radius r, width dr centred at
(cx, cy) (mm)
r, cx, cy = 0.5, 2, 2
r2 = r**2
for i in range(nx):
    for j in range(ny):
        p2 = (i*dx-cx)**2 + (j*dy-cy)**2
        if p2 < r2:
            u0[i, j] = Thot

def do timestep(u0, u):
    # Propagate with forward-difference in time, central-difference in
space
    u[1:-1, 1:-1] = u0[1:-1, 1:-1] + D * dt * (
        (u0[2:, 1:-1] - 2*u0[1:-1, 1:-1] + u0[:-2, 1:-1])/dx2
        + (u0[1:-1, 2:] - 2*u0[1:-1, 1:-1] + u0[1:-1, :-2])/dy2 ) -
    dt*(u0[2:, 1:-1]-u0[1:-1, 1:-1])/dx - dt*(u0[1:-1, 2:]-u0[1:-1, 1:-1])/dy
```

```

1])/dy

    u0 = u.copy()
    return u0, u

# Number of timesteps
nsteps = 101
# Output 4 figures at these timesteps
mfig = [0, 30, 70, 100]
fignum = 0
fig = plt.figure()
for m in range(nsteps):
    u0, u = dotimestep(u0, u)
    if m in mfig:
        fignum += 1
        print(m, fignum)
        ax = fig.add_subplot(220 + fignum)
        im = ax.imshow(u.copy(), cmap=plt.get_cmap('hot'),

vmin=Tcool, vmax=Thot)
        ax.set_axis_off()
        ax.set_title(' :.1 f  ms'.format(m*dt*1000))
fig.subplots_adjust(right=0.85)
cbarax = fig.add_axes([0.9, 0.15, 0.03, 0.7])
cbarax.set_xlabel('$T$ / K', labelpad=20)
fig.colorbar(im, cax=cbarax)
plt.show()

```

8. Nguồn tham khảo

- (1) PGS.TS Nguyễn Thông, Phương pháp số ứng dụng
- (2) PGS.TSKH Bùi Tá Long, Bài tập mô hình môi trường phần ô nhiễm nước sông
- (3) Võ Văn Thế, Bài toán khuếch tán nhiệt độ
- (4) Learning Scientific Programming with Python, The two-dimensional diffusion equation, <https://scipython.com/book/chapter-7-matplotlib/examples/the-two-dimensional-diffusion-equation/>