

УДК 502.2:519.8
Ц 94

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОПАСНОЙ ПРИМЕСИ В АТМОСФЕРЕ С УЧЕТОМ ЕЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ВОДНОЙ СРЕДОЙ

А. Л. Цыкало, д-р хим. наук, проф.¹;

О. А. Сагдеева, магистр по охране окружающей среды, преп.²

¹Одесская государственная академия холода, г. Одесса

²Техникум газовой и нефтяной промышленности
Одесской государственной академии холода, г. Одесса

Аннотация. Для оценки уровня экологической безопасности разработана математическая модель распространения примеси в атмосферном воздухе с учетом ее взаимодействия с водной средой. Представлено сравнение аналитического решения с численным. Модель пригодна для решения учебных и практических задач по предупреждению и ликвидации негативных последствий хозяйственной деятельности.

Ключевые слова: математическая модель, экологическая безопасность, численное и аналитическое решение, перенос примеси, граница раздела фаз «воздух–вода».

Анотація. Для оцінки рівня екологічної безпеки розроблено математичну модель поширення домішки в атмосферному повітрі з урахуванням її взаємодії з водним середовищем. Наведено порівняння аналітичного розв'язання з числовим. Модель придатна для вирішення навчальних і практичних задач щодо попередження та ліквідації негативних наслідків господарської діяльності.

Ключові слова: математична модель, екологічна безпека, числове й аналітичне розв'язання, перенесення домішки, межа розділення фаз «повітря–вода».

Abstract. The mathematical model has been developed for additives distribution in the atmospheric air considering its interaction with aqueous medium. It has been developed as a practical component of assessing the ecological safety level. A comparison of the model analytical and numerical solutions is represented. The model is applicable for solving educational and practical problems on prevention and elimination of negative effect from human activity.

Keywords: mathematical model, environmental safety, numerical and analytical solutions, pollutant transfer, border of phases «air–water».

ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМЫ

Обеспечение экологической безопасности является одной из важнейших задач в любой области хозяйственной деятельности, поскольку стратегии устойчивого безопасного развития стремятся следовать все мировое содружество.

Однако, несмотря на использование достижений научно-технического прогресса в сфере природоохранных технологий, ресурсосбережения и противоаварийных мероприятий, риск катастроф и чрезвычайных ситуаций при эксплуатации любого потенциально опасного объекта сохраняется. В настоящее время надежным критерием экологической безопасности признан уровень экологического риска. Одним из условий возникновения экологического риска является наличие потенциально опасного объекта и других источников экологической опасности, создающих угрозу поступления нарушающих естественные условия обитания токсичных, взрыво- и пожароопасных веществ в окружающую природную среду [1–5, 7, 8].

Основная часть экологически напряженных и потенциально опасных предприятий размещена на берегах водных объектов. Именно поэтому при оценке уровня экологического риска необходим учет не только

распространения примеси в пределах одной среды (например, газового облака в атмосфере или нефтяного пятна в воде), но и переход этой примеси из одной среды в другую. На основе анализа опыта техногенных аварий и экологических катастроф все источники загрязнений можно разделить на четыре основные группы:

- находящиеся в глубине материка;
- расположенные в прибрежной зоне на суше или воде;
- размещенные в приповерхностной зоне акватории в удалении от материка;
- находящиеся в глубине водоема.

Так или иначе, в любом из указанных случаев при эксплуатации потенциально опасного объекта или возникновении аварийной ситуации загрязняющее вещество, находящееся, например, первоначально в газообразном состоянии (аммиак, хлор, метан, природный газ и т. п.), контактирует с атмосферным воздухом и водной средой.

Особенности распространения примеси зависят от гидрометеорологических условий, орографической неоднородности территории, химических и фотохимических превращений примеси, характера взаимодействия с подстилающей поверхностью, что в общем случае необходимо учитывать при оценке, анализе и прогнозе неблагоприятной экологической ситуации.

Надежным методом анализа распространения, трансформации и рассеяния примеси является математическое моделирование, результаты которого могут быть эффективно использованы при оценке риска, поскольку уровень риска является количественной характеристикой экологической опасности. При его определении следует располагать сведениями об уровне концентрации опасного загрязняющего вещества в среде, который далеко не всегда удается определить инструментальным путем, особенно если ставится задача предсказать причины возникновения, пути развития, характер и масштабы возможной аварии или катастрофы.

Существующие теоретические и модельные представления о распространении вещества в среде, хотя и используют различные подходы и разную степень приближения при описании реально протекающих процессов и обладают определенными преимуществами, тем не менее имеют отдельные недостатки. Одним из них является пренебрежение эффектом перехода примеси из одной среды в другую. Особый интерес в этом плане представляет изучение процессов в переходном слое «атмосферный воздух–водная среда» (или «водная среда–атмосфера») с учетом тепло- и массопереноса, которые в общем случае могут сопровождаться процессами растворения, диффузии, химическим взаимодействием компонентов. Такой анализ имеет большое практическое значение, например, для случаев распространения аммиака, метанола, хлора и других токсичных веществ.

АНАЛИЗ ПОСЛЕДНИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ПУБЛИКАЦИЙ

В исследованиях по распространению примеси можно выделить эмпирико-статистический метод, теоретические исследования переноса загрязнений и формирования полей их концентрации, полуэмпирический метод, аналоговое моделирование.

Наиболее надежными и способными учесть широкий круг сопутствующих явлений и процессов можно считать методы математического моделирования. Так, задача расчета и прогноза распространения атмосферных примесей может быть решена одновременно с прогнозом метеорологических условий. Обе эти задачи решаются на основе физико-химических закономерностей, представленных в форме баланса для атмосферных примесей [4]. В зависимости от постановки задачи и принятых граничных условий уравнение баланса атмосферных примесей имеет множество решений: при стационарных процессах для пограничного слоя атмосферы, постоянном направлении ветра, постоянном коэффициенте турбулентности и т. п. Соответствующий анализ показывает, что при фиксированном времени концентрация примеси в пространстве будет уменьшаться с увеличением расстояния между точкой пространства

и источником. При малых коэффициентах турбулентности это уменьшение происходит быстрее, чем при больших, так как скорость распространения примеси растет с увеличением этого коэффициента. Это отражает характер распространения ограниченного количества примеси от мгновенного точечного источника на все большее пространство [4, 9].

Облако загрязняющего вещества, локализованное, в основном, в нижней и средней тропосфере, перемещается как единая система. В процессе перемещения оно обычно имеет «кометообразную» форму, особенно в зоне малого изменения рельефа. В районах больших высот рельефа может иметь место разделение начального облака на 2–3 облака меньших размеров. Некоторые из них образуются в результате «переваливания» облака через хребет, некоторые — за счет «бокового» обтекания. Исследования возможных траекторий перемещения облака загрязняющего вещества показали, что они существенно зависят от начального положения облака [3, 11].

Поведение примеси в водной среде также может быть описано трехмерным уравнением турбулентной диффузии [6, 10]. Граничные условия для этого случая состоят в том, что на всех поверхностях, ограничивающих рассматриваемую область бассейна, необходимо знать либо поток примеси (диффузионный или адвентивный), либо ее концентрацию. Это позволяет ставить разные типы задач и учитывать действия разнообразных источников: расположенных на поверхности водного объекта, дне и берегу. Изменяя глубину выпуска загрязнений в зависимости от типа циркуляции вод, можно получить различные схемы их распространения [2]:

- перенос примеси поверхностным течением;
- распространение примеси в слое противотечения;
- поступление примеси в придонные слои моря.

Постановка конкретного вида граничных условий зависит от физических свойств примеси, а также осадочных пород, составляющих берег. Решение краевой задачи очень сложно. Большие затруднения возникают из-за необходимости знания трехмерной структуры течений и коэффициентов турбулентной диффузии. Однако при условии, что известны все составляющие скорости течений и коэффициенты турбулентной диффузии, решение задачи позволяет получить картину распределения концентрации примеси вследствие ее гидродинамического взаимодействия с водной средой.

Некоторые авторы [7, 12] рассматривали задачу о распределении концентрации в зависимости от способа ее попадания в водную среду, но без учета взаимодействия с атмосферой. При изучении процессов формирования поля примеси от мощных источников длительного действия с учетом сложных течений невозможно получать аналитические решения основного уравнения баланса примесей. Поэтому его соответствующие решения приходится искать путем

применения различных численных методов (конечно-разностных, интегральных и спектральных) [2].

Для общего метода, основанного на использовании дифференциальных уравнений турбулентной диффузии с учетом выпадения примеси и поглощения ее водной поверхностью, необходимо выполнить анализ системы уравнений, соответствующих начальных и граничных условий для различных случаев взаимодействия «вещество–переходный слой» и «вещество–вода», в том числе рассмотреть варианты для растворимой, нерастворимой и частично растворимой примесей, химическое взаимодействие вещества с водой с выделением (поглощением) тепла и т. п.

В наиболее интересующем нас случае крупных разливов — выбросов и утечек опасного вещества (обычно сопровождающихся образованием больших озер с последующим длительным загрязнением окружающей атмосферы) — ситуация осложняется рядом важных обстоятельств. Основные из них таковы:

а) следует определить зависимость производительности источника вредной примеси от времени в реальных условиях на разных стадиях развития аварийной ситуации;

б) необходимо учесть сложный характер изменения производительности источника вредной примеси от времени;

в) нужно учесть изменения метеорологических условий в процессе рассеивания вредной примеси (поскольку общая длительность действия источника может составлять несколько часов, суток и даже недель);

г) с целью обеспечения достаточной точности расчетов целесообразно учесть образование аэрозольных систем (облаков) при крупных разливах низкотемпературных веществ (аммиак, хлор, метан, сжиженный природный газ и т. п.).

ЦЕЛЬ РАБОТЫ — получить представление о поведении загрязняющего вещества на границе раздела фаз «атмосфера–водная среда», а также сравнить численное решение модели с аналитическим.

ИЗЛОЖЕНИЕ ОСНОВНОГО МАТЕРИАЛА

Задача решается в двух взаимосвязанных и взаимодополняющих аспектах. Во-первых, рассматривается возможность поиска решения, основанного на современных представлениях о протекающих процессах и нахождении строгих аналитических решений или результатов численного моделирования с заранее оговоренной и разумной в данном случае точностью.

В рамках этого подхода рассмотрены дифференциальные уравнения баланса примесей, распространяющихся в атмосфере и водной среде. Проанализированы варианты соответствующих начальных и граничных условий, а также процессы трансформации примесей в атмосфере (вымывание осадками, сухое осаждение, влияние орографии и пр.) и воде (химические взаимодействия, коагуляция, дисперги-

рование и др.), процессы распространения примеси в переходном слое «воздух–вода» (всплывающая, пассивная и оседающая примеси, влияние твердых и жидких границ бассейна, структура водного объекта). Рассмотрены возможности применения численных методов, устойчивость решений исходных систем уравнений, возможная и практически достижимая точность (с учетом точности и полноты необходимых исходных данных).

Для оценки точности приближенных решений и выбора шагов разностной сетки было проведено сравнение численных решений с аналитическими.

Математическая модель распространения примеси [5, 10] имеет вид

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{\partial w_j s}{\partial x_j} + \alpha s = F + \frac{\partial}{\partial x_j} k_j \frac{\partial s}{\partial x_j}, \quad (1)$$

где i, j — номер координаты; t — время; u — компонента скорости ветра по определенной координате; s — концентрация загрязняющего вещества; $F = F(t, x_i)$ — функция, описывающая постоянные источники примеси ($F = 0$ — в случае мгновенного выброса); k_j — тензор коэффициентов турбулентной диффузии; α — коэффициент разложения примеси (в том числе взаимодействия примеси с поверхностью водного объекта при его наличии).

При выборе надлежащих граничных условий уравнение (1) имеет единственное решение. Следует учесть, что в случае использования численных методов выбор границ определяется возможностями вычислительной техники. Для случая отсутствия водного объекта численное решение уравнения (1) сопоставлялось с аналитическим решением стационарного уравнения распространения примеси при неизменных скорости ветра и коэффициентах турбулентной диффузии:

$$s = \frac{M}{4\pi x \sqrt{k_y k_z}} \exp\left(-\frac{uy^2}{4k_y x}\right) \left\{ \exp\left[-\frac{u(z+H)^2}{4k_z x}\right] + \exp\left[\frac{u(z+H)^2}{4k_z x}\right] \right\}.$$

На рис. 1 приведены результаты расчета на высоте 2 м от поверхности земли по направлению ветра при следующих заданных параметрах: $M = 106$ мг/с, $H = 120$ м, $u = 4$ м/с, $k_x = k_y = 500$ м²/с, $k_z = 5$ м²/с, $\Delta x = \Delta y = 250$ м, $\Delta z = 30$ м.

В случае мгновенного выброса при отсутствии водного объекта для сравнения с численным решением использовали нестационарное аналитическое решение в виде

$$s = p \left[-\frac{(x-ut)^2}{4k_x t} - \frac{y^2}{4k_y t} \right] \left\{ \exp\left[-\frac{(z-H)^2}{4k_z t}\right] + \exp\left[\frac{u(z+H)^2}{4k_z t}\right] \right\},$$

которое было получено с использованием граничных условий «отражения» $\Delta p / \Delta z = 0$ для $z = 0$ при

действию мгновенного источника мощностью M в точке $(0, 0, H)$ в момент времени $t=0$. Расчеты проводились для тех же параметров, что и для стационарного источника с шагом в 30 с. Полученные численным методом и на основе аналитического решения кривые концентрации примеси на высоте 2 м от поверхности по направлению ветра приведены на рис. 2.

Задача определения влияния водной среды на распространение примеси решается в два этапа: сначала исследуется трансформация полей скорости ветра и коэффициента турбулентного обмена над водоемом, а затем находим концентрацию примеси от источника на основе решения уравнения турбулентной диффузии с коэффициентами, полученными на первом этапе.

Базовой гидродинамической моделью для исследования процессов переноса в нашем случае была модель, основанная на пленочной теории [1].

Коэффициент молекулярной диффузии в газах и жидкости, как известно, зависит от свойств диффундирующего компонента и среды, в которой происходит диффузия, а также от температуры и давления. Зная коэффициент абсорбции, в случае одномерного

распространения примеси (по координате z) можно записать следующее уравнение стока примеси из воздуха в водную среду:

$$\frac{\partial}{\partial z} D_i \frac{\partial s}{\partial z} + F = 0,$$

где D_i — коэффициент диффузии (абсорбции) примеси; $F=6$ мкг/(м³·с) — член, описывающий источник выброса; $D_{\text{газ-воздух}}=23,3 \cdot 10^{-6}$ м²/с — коэффициент молекулярной диффузии газовой примеси в воздухе; $D_{\text{газ-жидкость}}=3,6 \cdot 10^{-5}$ м²/с — коэффициент абсорбции газовой примеси водой.

Для поиска численного решения пользовались методом контрольного объема [8]. Подобный метод прогонки детально разработан для одномерных задач, но может быть эффективно использован для решения дву- и трехмерных уравнений. С его помощью был выполнен расчет стока примеси над водным объектом (случай одномерный), когда уменьшение концентрации происходит по высоте и глубине.

На основании результатов расчета можно сделать вывод о том, что, учитывая только диффузию, можно

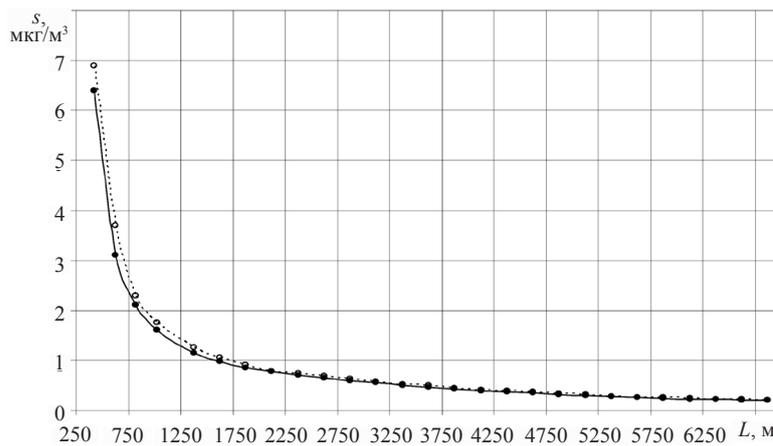


Рис. 1. Концентрация примеси на высоте 2 м от поверхности земли (непрерывный источник примеси) при отсутствии водного объекта: — — численное решение; ---- — аналитическое решение

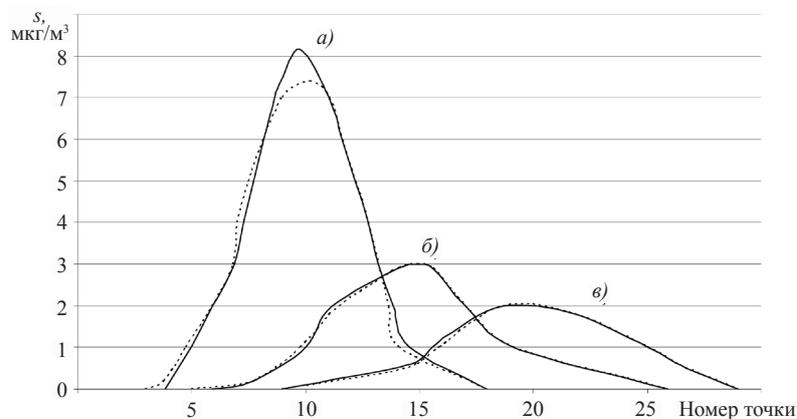


Рис. 2. Изменение концентрации примеси на высоте 2 м от поверхности (мгновенный выброс) при отсутствии водного объекта в моменты времени после выброса через: а) — 5 мин; б) — 10 мин; в) — 15 мин; — — численное решение; ---- — аналитическое решение

определить уменьшение концентрации примеси (в нашем случае — на 60 %). Решение задачи позволяет построить модель трансформации воздушной массы над водоемом как с учетом термических факторов, обусловленных разницей температур «берег–вода», так и динамических факторов, связанных со скачком шероховатости при переходе с суши на водную поверхность.

Схемы распространения примеси от источника выброса на берегу в присутствии замкнутого и условно неограниченного водных объектов представлены на рис. 3 и 4 соответственно. В случае расчета приземной концентрации от источника на высоте 2 м при перемещении воздушного потока над водоемом с учетом эффекта поглощения примеси водной поверхностью найдена зависимость, представленная на рис. 5.

Поскольку водная поверхность постоянно поглощает примесь, ее концентрация в непосредственной близости к водной поверхности заметно уменьшается. На подветренных берегах концентрация может быстро увеличиваться и достигать примерно тех же значений, что и для однородной поверхности. Однако если над водоемом преобладают нисходящие течения и турбулентность меняется, то здесь возможны концентрации большие, чем над горизонтально однородной поверхностью (рис. 6).

ВЫВОДЫ

1. Рассмотрена общая задача распространения экологически опасной примеси в атмосфере, на границе «атмосферный воздух–вода» и в водной среде в результате аварийных разливов, утечек и выбросов опасных веществ и материалов, что может служить основой для определения уровня экологического риска и оценки экологической безопасности. 2. Показано, что наличие водных объектов и их географическое расположение оказывают специфическое влияние на процессы распространения примеси при разливе, утечке, выбросе токсического, взрыво- и пожароопасного веществ. 3. Предложена математическая модель, способная учитывать поведение примеси вблизи и над водным объектом, на основе которой можно изучать распространение как динамически активной, так и пассивной примесей. 4. Рассмотрено решение систем дифференциальных уравнений с помощью метода конечных разностей, который позволяет получить результаты с достаточной точностью. 5. Представлено сравнение численного решения модели с существующими и известными в литературе аналитическими уравнениями. 6. Модель в настоящее время используется для определения уровня экологического риска в системе безопасности крупнейшего предприятия химической отрасли Украины — Одесского припортового завода, расположенного в непосредственной близости от г. Одессы на берегу Аджалыкского лимана.

Авторы благодарят студента Д. В. Попова за участие в выполнении расчетов.

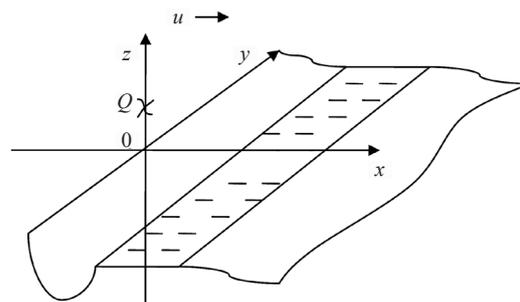


Рис. 3. Геометрия распространения выброса в направлении водного объекта ограниченной ширины (направление вектора распространения примеси совпадает с осью x)

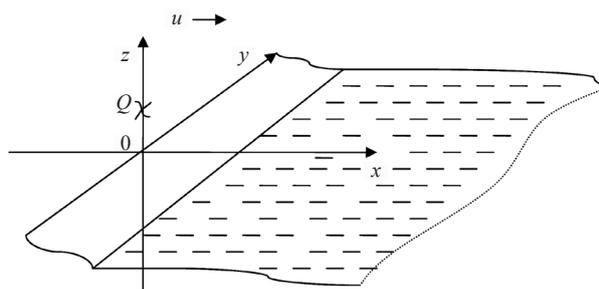


Рис. 4. Геометрия распространения выброса в направлении поверхности полубесконечного водного объекта

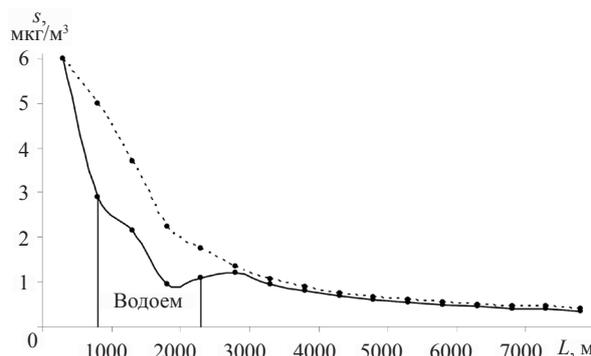


Рис. 5. Концентрация примеси на высоте 2 м в присутствии водного объекта ограниченной ширины (см. рис. 3): — численное решение; ---- аналитическое решение в случае отсутствия водного объекта

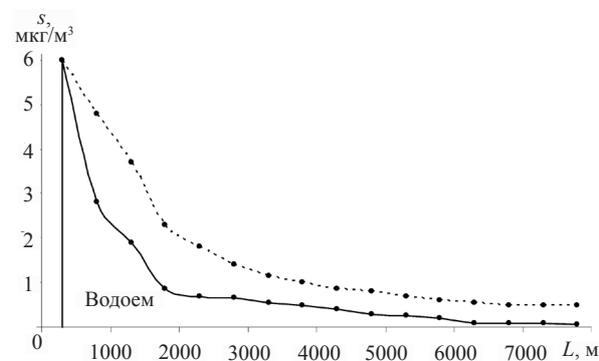


Рис. 6. Концентрация примеси на высоте 2 м в присутствии полубесконечного водного объекта (см. рис. 4): — численное решение; ---- аналитическое решение распространения примеси без водного объекта

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Астарита, Дж.** Массопередача с химической реакцией [Текст] / Дж. Астарита. — Л. : Химия, 1971. — 224 с.
- [2] **Белоусова, Э. И.** Сгонно-нагонная циркуляция вод и распространение примеси в прибрежной зоне моря [Текст] / Э. И. Белоусова, В. С. Латун // Морские гидрофизические исследования. — 1975. — № 3 (70). — С. 54–65.
- [3] **Берлянд, М. Е.** Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы [Текст] / М. Е. Берлянд. — Л. : Гидрометеиздат, 1985. — 272 с.
- [4] **Берлянд, М. Е.** Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы [Текст] / М. Е. Берлянд. — Л. : Гидрометеиздат, 1975. — 448 с.
- [5] **Колмогоров, А. Н.** Об аналитических методах в теории вероятностей [Текст] / А. Н. Колмогоров // Успехи математических наук. — 1932. — Вып. 5. — С. 5–41.
- [6] **Коркадзе, А. А.** Численное моделирование распространения примеси в Черном море и атмосфере Кавказа [Текст] / А. А. Коркадзе, Д. И. Деметрашвили, А. А. Сурмава // Екологія довкілля та безпека життєдіяльності. — № 6. — 2004. — С. 31–41.
- [7] Охрана окружающей среды [Текст] / А. М. Владимиров, Ю. И. Ляхин, Л. Т. Матвеев, В. Г. Орлов. — Л., 1991. — 423 с.
- [8] **Патанкар, С. В.** Численное решение задач теплопроводности и конвективного теплообмена при течении в каналах [Текст] / С. В. Патанкар. — М. : МЭИ, 2003. — 312 с.
- [9] **Семенченко, Б. А.** Метеорологические аспекты охраны природной среды [Текст] / Б. А. Семенченко, П. Н. Белов. — М. : Изд.-во МГУ, 1984. — 95 с.
- [10] **Цыкало, А. Л.** Математическое моделирование процессов распространения примеси на границе «воздух–вода» [Текст] / А. Л. Цыкало, О. А. Сагдеева, Д. В. Попов // Холодильная техника и технология. — № 5 (127). — 2010. — С. 44–48.
- [11] **Цыкало, А. Л.** Методика моделирования процессов испарения и рассеивания аммиака в атмосфере при авариях. Автоматизированная компьютерная система расчета концентрационных полей аммиака в атмосфере при его аварийных разливах, утечках и выбросах [Текст] / А. Л. Цыкало. — О., 2006 — 56 с.
- [12] **Kordzadze, A.** A non-adiabatic model of the development of the middle scale atmosphere processes above the Caucasian region [Text] / A. Kordzadze, A. Surmava // Georgian Geophys. Soc. — 2001. — Vol. 6B. — P. 33–40.

© А. Л. Цыкало, О. А. Сагдеева

Надійшла до редколегії 20.01.2012

Статтю рекомендує до друку член редколегії Вісника НУК
д-р техн. наук, проф. *М. І. Радченко*

Статтю розміщено у Віснику НУК № 2, 2012