УДК 504.054. + 519.713;5327596;5517465/466

ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ И РАССЕИВАНИЯ РЕАГИРУЮЩИХ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В МНОГОФАЗНЫХ, МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ВЗАИМОПРОНИКАЮЩИХ МНОГОСКОРОСТНЫХ СПЛОШНЫХ СРЕДАХ

Айдосов А.А., Айдосов Г.А., Нарбаева С.М.

Научно-исследовательский институт математики и механики Республиканского государственного предприятия на праве хозяйственного ведения «Казахский национальный университет им. аль-Фараби» Министерства образования и науки Республики Казахстан, Алматы, e-mail: allayarbek@mail.ru

Газообразные и конденсированные продукты выбрасываются в окружающую среду в результате работы промышленных предприятий и автотранспорта, например оксиды углерода, азота и серы, альдегиды, бензапирен, свинец и др. В приземном слое в процессе фотохимических реакций образуются озон и другие, опасные для здоровья человека и состояния растительного и животного мира токсиканты. При определенных метеорологических условиях даже незначительные выбросы загрязняющих веществ могут создавать неблагополучную экологическую обстановку в населенных пунктах. Еще большую опасность представля.т природные и техногенные катастрофы, в результате которых возможно крупномасштабное загрязнение природной среды. Возникновение пожаров на значительных территориях, в том числе лесных, может привести к таким явлениям, как огненный шторм и «ядерная зима». Кроме того, в последнее время становятся актуальными проблемы, связанные с защитой водной среды от загрязнения. А экспериментальное, промышленные и полупромышленные, а также натурные изучение вышеуказанных явлений условиями является очень дорогостоящим, а в отдельных случаях не представляется возможным проводить полное физическое моделирование, представляют интерес теоретические методы исследования – методы математического моделирования. В этом случае объект изучения не само явление, а его математическая модель, которая может представлять собой систему дифференциальных уравнений в частных производных с соответствующими начальными и граничными условиями. В рамках данной проблемы один из наиболее сложных и наименее разработанных (в том числе и в методическом плане) вопросов связан с исследованиями по изучению изменений компонентов природной среды, методами математического моделирования в условиях различного рода техногенных загрязнений. Эти исследования являются одним из важных этапов экологической программы, они вскрывают особенности воздействия антропогенной нагрузки на среду обитания.

Ключевые слова: окружающая среда, здоровье человека, фотохимические реакции, загрязнение природной среды

PROBLEMS MATHEMATICAL MODELING OF PROPAGATION AND DISPERSION REACTIVE POLLUTANT IN MULTIPHASE, MULTICOMPONENT INTERPENETRATING MULTI-SPEED CONTINUOUS MEDIUM

Aydosov A.A., Aydosov G.A., Narbaeva S.M.

Research Institute for mathematics and mechanics Republican State enterprise on the right of economic management «The Kazakh National University. Al-Farabi Kazakh National University» of the Ministry of education and science of the Republic of Kazakhstan, Almaty, e-mail: allayarbek@mail.ru

Gaseous and condensed products are released into the environment from industry and vehicles, such as oxides of carbon, nitrogen and sulfur, aldehydes, benzopyrene, lead and others. Surface layer in the process of photochemical reactions form ozone and other hazardous to human health and state of flora and fauna toxicants. Under certain weather conditions, even minor emissions of substances may cause adverse environmental conditions in human settlements. Even more dangerous is the natural and man-made disasters, which may result in large-scale environmental pollution. Occurrence of fires over large areas, including forests, can lead to such phenomena as the firestorm and «nuclear winter». In addition, in recent years become important issues related to the protection of the aquatic environment from pollution. A experimental, industrial and semi-industrial, as well as full-scale study of these phenomena is very costly conditions, and in some cases it is not possible to carry out a complete physical simulation of interest theoretical research methods – methods of mathematical modeling. In this case, the object of study is not the phenomenon itself, and its mathematical model which can represent a system of differential equations with the appropriate initial and boundary conditions. As part of this problem, one of the most difficult and least developed (including methodologically) issues associated with research on the study of changes in the components of the environment, methods of mathematical modeling in a different kind of man-made pollution. These studies are one of the important stages of environmental programs, they reveal the characteristics of the impact of anthropogenic load on the environment.

Keywords: environment, human health, photochemical reactions, pollution of the environment

В данной работе рассматривается математическое моделирование, использующее детерминированный подход, со следующими этапами [1–3]:

1. Физический анализ изучаемого явления и создание физической модели объекта.
2. Определение реакционных свойств среды, коэффициентов переноса и струк-

турных параметров среды и вывод основной системы уравнений с соответствующими начальными и граничными условиями.

3. Выбор метода численного или аналитического метода решения поставленной краевой задачи.

4. Получение дискретного аналога для соответствующей системы уравнений, если предполагается численное решение.

5. Выбор метода получения решения для дискретного аналога.

6. Разработка программы расчета для вычислительной машины. Тестовые проверки программы расчета. Получение численного решения системы дифференциальных уравнений.

7. Сравнение полученных результатов с известными экспериментальными данными, их физическая интерпретация. Параметрическое изучение исследуемого объекта.

Главное требование к математической модели – согласованность полученных результатов численного анализа с данными натурного наблюдения и экспериментальных исследований. Для выполнения этого достаточного условия необходимо, чтобы:

– в математической модели выполнялись фундаментальные законы сохранения массы, энергии и импульса;

– математическая модель правильно отражала сущность изучаемого явления.

Для исследования вышеупомянутых сложных явлений перспективно использование понятий и методов механики сплошных многофазных многокомпонентных многоскоростных реагирующих сред [4, 5].

Таким образом, с помощью построенной математической модели (в приземном слое атмосферы, в водной среде и т.д.) можно исследовать динамику распространения загрязнения под влиянием различных внешних условий (температуры воздуха, скорости ветра, температурной стратификации в атмосфере и т.д.), а также параметров источника загрязнения. Сравнивая полученные данные с установленными предельно-допустимыми концентрациями (ПДК), можно проанализировать уровни загрязнения по различным компонентам в различные моменты времени и предложить пути снижения концентрации загрязнений воздушного бассейна. Процесс переноса моделируется смешанной краевой задачей математической физики и включает уравнение переноса с учетом турбулентной диффузии. При постановке задачи граничные условия задаются на самом нижнем слое $z = 0$ и на самом верхнем слое $z = h_3$, рассматриваются условия сопряжения на границах разделения слоев.

Моделирование региональных атмосферных процессов реализуется с учетом того, что поля метеорологических величин в ограниченной области формируются под влиянием макромасштабных циркуляций атмосферы. Поэтому ограниченная область решения рассматривается как часть некоторого целого, и нестационарные краевые условия на ее боковых границах формулируются на основе данных, полученных для окаймляющей области. Кроме этого, при численном решении задач прогноза состояния атмосферы для ограниченной территории появляется необходимость сгущать сетку для достижения требуемой точности решения задачи в местах больших градиентов зависимых функций.

Слой почвы можно разделить на три части: поверхность почвы, являющейся границей двух сред; слой суточных колебаний температуры (~1 м); слой годовых колебаний температуры (~10 м). Толщина выделенных в почве слоев зависит от свойств почвы.

Неизвестные функции в уравнениях гидродинамики турбулентной атмосферы и диффузии примесей представим в виде суммы

$$Y(t,x,y,z) = \overline{Y}(t) + Y'(t,x,y,z),$$

где $\overline{Y}(t) = \frac{1}{\sigma}\iiint\limits_{(\sigma)} Y(t,x,y,z)dxdydz$ – среднее значение функции в блоке (σ – объем блока), а $Y'(t,x,y,z)$ – отклонение от среднего внутри блока. И затем усредним уравнения гидродинамики турбулентной атмосферы и диффузии примесей по объему блока σ, используя свойства операции осреднения:

$$\overline{A\xi + B\xi} = A\overline{\xi} + B\overline{\varphi};\ \overline{\overline{\xi}\overline{\varphi}} = \overline{\xi}\overline{\varphi};$$

$$\overline{\frac{\partial\xi}{\partial s}} = \frac{\partial\overline{\xi}}{\partial s};\quad \overline{\xi'} = 0,$$

где ξ, φ – функции независимых переменных x, y, z, t; A, B – постоянные; s – любая из этих независимых переменных.

Записав уравнения гидродинамики турбулентной атмосферы и диффузии примесей, используя методы механики сплошных многофазных многокомпонентных многоскоростных реагирующих сред для каждого блока модели с учетом взаимодействия между блоками и присоединив к ним уравнения переноса веществ и радиации, получим систему уравнений блочной модели локального процесса:

$$\frac{du}{dt} = \alpha_1(U_1 - u) + \alpha_2(U_2 - u) + lv + \frac{1}{L}\left(U_3 - u\overline{V}\right),\quad (i = 1, 2, 3);$$

$$\frac{dv}{dt}=\alpha_1(U_4-v)+\alpha_2(U_5-v)+lu+\frac{1}{L}\left(U_6-v\overline{V}\right),\quad (i=1,2,3);$$

$$\frac{dw}{dt}=\alpha_1(U_7-w)+\alpha_2(U_8-w)+\frac{1}{L}\left(U_9-w\overline{V}\right)-g,\quad (i=1,2,3);\qquad (*)$$

$$\frac{d\theta}{dt}=\frac{1}{c_p\rho}\left(U_{10}-G_m\right)+\alpha_1(U_{11}-\theta)+\alpha_2(U_{12}-\theta)+\frac{1}{L}\left(U_{13}-\theta\overline{V}\right)+U_{14},\quad (i=1,2,3);$$

$$\frac{dq}{dt}=-\frac{m}{\rho}+\alpha_1(U_{15}-q)+\alpha_2(U_{16}-q)+\frac{1}{L}\left(U_{17}-q\overline{V}\right)+U_{18},\quad (i=1,2,3);$$

$$\frac{d\delta}{dt}=m+\frac{1}{L}\left(U_{19}-\delta\overline{V}\right)+U_{20}-\frac{1}{L}\left(\delta\overline{V_\delta}-U_{21}\right)+\alpha_1(U_{22}-\delta)+\alpha_2(U_{23}-\delta),\quad (i=1,2,3);$$

$$\frac{dc^T}{dt}=\alpha_1(U_{24}-c^T)+\alpha_2(U_{25}-c^T)-\alpha_c^T c^T+\frac{1}{L}\left(U_{26}-c^T\overline{V}\right)-\frac{1}{L}\left(c^T\overline{V_c}-U_{27}\right)+U_{28},\ (i=1,2,3);$$

$$\frac{dc^\Gamma}{dt}=\alpha_1\left(U_{29}-c^\Gamma\right)+\alpha_2\left(U_{30}-c^\Gamma\right)-\alpha_c^\Gamma c^\Gamma+\frac{1}{L}\left(U_{31}-c^\Gamma\overline{V}\right)+U_{32},\quad (i=1,2,3);$$

$$\frac{dT}{dt}=\frac{1}{l_0c^*\rho^*}U_{33}+\alpha_1(U_{34}-T)+\alpha_2(U_{35}-T)+G\alpha_1(U_{36}-q)+U_{37},\quad (i=0);$$

$$\frac{dT}{dt}=-\frac{G}{c^*\rho^*}\overline{m_0}+\alpha_1(U_{38}-T)+\alpha_2(U_{39}-T),\quad (i=-1,-2);$$

$$\frac{dW_B}{dt}=-\frac{\overline{m_0}}{\rho^*}-\frac{J\Delta(\xi)}{\rho^*}+\alpha_1(U_{40}-W_B)+\alpha_2(U_{41}-W_B),\quad (i=-1,-2);$$

$$\frac{dW_\Pi}{dt}=\frac{\overline{m_0}}{\rho^*}+\alpha_1(U_{42}-W_\Pi)+\alpha_2(U_{43}-W_\Pi),\quad (i=-1,-2);$$

$$\frac{d(W_\Pi+W_B)}{dt}=\frac{1}{\rho^*l_0}\left[J+G\alpha_1(U_{36}-q)+\alpha_1(U_{44}-\delta)+U_{45}+\alpha_2(U_{41}-W_B)+\alpha_2(U_{33}-W_\Pi)\right],\ (i=0).$$

Скорость фазовых переходов влаги m в случае термодинамического процесса в воздухе, насыщенном водяным паром, определяется формулой

$$m=-\frac{dq_{HAC}}{dt}+\frac{q_{HAC}}{\theta}\frac{d\theta}{dt},$$

где $$q_{HAC}=\frac{0{,}622\,E_{HAC}}{p_A};$$

$$E_{HAC}=6{,}1\cdot10^{\frac{7{,}45(T-273)}{T-38}};$$

$\overline{V}$ – скорость ветра; $U_1=u_{i+1j}$; $U_2=u_{i-1j}$;

$U_3=u_{ij-1}\overline{V}_{ij-1}$; $U_4=v_{i+1j}$; $U_5=v_{i-1j}$;

$U_6=v_{ij-1}\overline{V_{ij-1}}$; $U_7=w_{i+1j}$; $U_8=w_{i-1j}$;

$U_9=w_{ij-1}\overline{V_{ij-1}}$; $U_{10}=\varepsilon_{\pi ij}$; $U_{11}=\theta_{i+1j}$;

$U_{12}=\theta_{i-1j}$; $U_{13}=\theta_{ij-1}\overline{V_{ij-1}}$; $U_{14}=\Delta\theta_{ij}$;

$U_{15}=q_{i+1j}$; $U_{16}=q_{i-1j}$; $U_{17}=q_{ij-1}\overline{V_{ij-1}}$;

$U_{18}=\Delta q_{ij}$; $U_{19}=\delta_{ij-1}\overline{V_{ij-1}}$; $U_{20}=\Delta\delta_{ij}$;

$U_{21}=\dfrac{\delta_{i+1j}\overline{V_{i+1j}}\rho_{i+1j}}{\rho_{ij}}$; $U_{22}=\delta_{i+1j}$;

$U_{23}=\delta_{i-1j}$; $U_{24}=c^T_{i+1j}$; $U_{25}=c^T_{i-1j}$;

$U_{26}=c^T_{ij-1}\overline{V_{ij-1}}$; $U_{27}=\dfrac{c^T_{i+1j}\overline{V_{i+1j}}\rho_{i+1j}}{\rho_{ij}}$;

$U_{28}=\Delta c^T_{ij}$; $U_{29}=c^\Gamma_{i+1j}$; $U_{30}=c^\Gamma_{i-1j}$;

$U_{31}=c^\Gamma_{ij-1}\overline{V_{ij-1}}$; $U_{32}=\Delta c^\Gamma_{ij}$; $U_{33}=\varepsilon_{\pi 0j}$;

$U_{34}=T_{1j}$; $U_{35}=T_{-1j}$; $U_{36}=q_{1j}$;

$$U_{37} = \Delta T_{0j}; \quad U_{38} = T_{i+1j}; \quad U_{39} = T_{i-1j};$$

$$U_{40} = W_{Bi+1j}; \quad U_{41} = W_{Bi-1j}; \quad U_{42} = W_{\Pi i+1j};$$

$$U_{43} = W_{\Pi i-1j}; \quad U_{44} = \delta_{1j}; \quad U_{45} = \Delta W_{B0j},$$

где $\Delta\theta_{ij}, \Delta q_{ij}, \Delta\delta_{ij}, \Delta c_{ij}^{T}, \Delta c_{ij}^{\Gamma}, \Delta T_{0j}, \Delta W_{B0j}$ – антропогенные добавки в слои модели; i – номер блока по вертикали; j – номер блока по горизонтали; $i - 1$ – номер соседнего блока снизу; $i + 1$ – номер соседнего блока сверху; $j - 1$ – номер блока, из которого дует ветер; $j + 1$ – номер следующего блока по воздушному потоку, $\varepsilon_{\pi} = \dfrac{d\Phi}{dz}$;

$\Phi = J^{-} - J\uparrow - U + G$.

Следовательно, в предлагаемой блочной модели локального процесса довольно просто с математической точки зрения записана основная система уравнений, но вследствие схематизации процессов появились дополнительные коэффициенты, при поиске которых максимально используются известные физические закономерности и выражающие теоретические, полуэмпирические и эмпирические формулы. От определения этих коэффициентов во многом будет зависеть степень приближения модели к действительности.

Определим коэффициенты двух блоков («Диффузия» и «Радиация») первого варианта модели. Расчетные модели для α_1, α_2 определяются непосредственно из системы уравнения:

$$\frac{d\overline{Y}}{dt} = \alpha_1\left(\overline{U} - \overline{Y}\right) = dif^{Y};$$

$$\frac{d\overline{U}}{dt} = \alpha_2(\overline{Y} - \overline{U}) = dif^{U},$$

фиксируя время $t = \overline{t}$ [4]:

$$\alpha_{1,2} = -\frac{\overline{Y}(\overline{t}) - \overline{Y}(t_0)}{U(t_0) - U(\overline{t}) + \overline{Y}(\overline{t}) - \overline{Y}(t_0)} \cdot \frac{1}{\overline{t} - t_0} \ln \frac{U(\overline{t}) - \overline{Y}(\overline{t})}{U(t_0) - \overline{Y}(t_0)}.$$

Для определения $\overline{Y}(t)$ привлечется непрерывная модель диффузии.

Параметры r_k, a_k, h_k, p_k, e_k, для чистой влажной атмосферы можно рассчитать с помощью следующих формул, полученных [2]:

$$h_k = \frac{H_k(1-b) + b - A_k}{H_{k-1}(1-b) + b - A_{k-1}}; \quad a_k = \frac{A_k - A_{k-1}}{H_{k-1} - A_{k-1}}; \quad e_k = 1 - \frac{1}{4}\sum_{j=1}^{4} \exp(-\beta_j W_{k,k+1}),$$

где $H_k = \dfrac{s_k}{s_0} - 1{,}041 - 0{,}160\sqrt{M(0{,}949\, p_{A_k} / p_0 + 0{,}051)}$; $A_k = 0{,}172(MW_{k\infty})^{0{,}303}$; $b = 1/2$;

здесь s_0 – поток прямой радиации на верхней границе атмосферы (солнечная постоянная); s_k – поток прямой радиации на уровне с давлением; p_{Ak}, p – давление у поверхности земли; $M = f(h_0)$ – число оптических масс атмосферы, где h_0 – высота Солнца; A_k – функция поглощения прямой солнечной радиации водяным паром; $W_{k\infty}$ – содержание водяного пара в столбе единичного сечения с основаниями k, ∞ (в г/см^2):

$$W_{k\infty} = \frac{1}{g}\int_0^{p_A} q\, d\, p_A \approx \frac{1}{g}\sum_{i=1}^{N} q_k \Delta p_A,$$

где e_k – функция поглощения длинноволнового излучения водяным паром; $W_{k,h+1}$ – содержание водяного пара в столбе единичного сечения с основаниями k, $k + 1$; $\beta_1 = 0{,}166$, $\beta_2 = 2{,}60$, $\beta_3 = 36{,}2$, $\beta_4 = 114$.

Вычислительный эксперимент реализации на ЭВМ численных расчетных моделей переноса и диффузии примеси в пограничном слое атмосферы и по его результатам построение геоэкологической карты загрязненности орографии местности на примере Карачаганакского нефтегазоконденсатного месторождения.

Моделировался суточный ход температуры в одной ячейке модели в летний, безоблачный, безветренный день для широты 55,7° и склонения Солнца 23,4°. Поверхность считалась достаточно увлажненной ($q_0 = q_{HAC}(T_0)$) с коэффициентом отражения (альбедо) $r = 0{,}2$. Твердые и газообразные примеси не учитывались. Задавалось начальное состояние: $T_{-1} = 287$, $T_0 = 283$, $\theta_1 = 285$, $\theta_2 = 282$, $\theta_3 = 260$, $q_1 = 0{,}0054$, $q_2 = 0{,}0045$, $q_3 = 0{,}0014$.

Система уравнений (*) интегрировалась методом Рунге – Кутта с шагом по времени $t = 1$ ч. Результаты расчетов сравнивались с данными экспедиционных наблюдений.

Экстренные дополнительные источники загрязнения природных сред

Основные причины аварий на объектах магистральных трубопроводов представлены на рис. 1–4.

Рис. 1. Авария на нефтегазовом комплексе

Рис. 2. Авария на трубопроводе с пожаром

Объемы аварийных утечек на магистральном трубопроводном транспорте нефти в 1999–2001 гг. составили соответственно 1332, 512 и 1530 м^3.

Рис. 3. Пожар на нефтяной скважине

Из-за внешних воздействий на нефтепроводах происходит более 5% аварий от общего их числа, а по наносимому ущербу они занимают первое место (рис. 4).

Рис. 4. Разлив нефти из-за трещин на трубопроводе

Произведен вычислительный эксперимент реализации расчетных моделей переноса и диффузии примеси в пограничном слое атмосферы и по его результатам построение геоэкологической карты загрязненности орографии местности в конвективных условиях и в инверсионных условиях. Распространение примесей в устойчивых атмосферных условиях проводилось для двух вариантов: в первом случае скорость ветра в приземном слое выбрана равная 2 м/с, а во втором – 4 м/с.

Время расчета соответствовало периоду полного продувания района месторождения, имеющего протяженность порядка 40 км.

Список литературы

1. Айдосов А.А., Айдосов Г.А. Теоретические основы прогнозирования природных процессов и экологической обстановки окружающей среды. Книга 1, Теоретические основы прогнозирования атмосферных процессов и экологической обстановки окружающей среды. – Алматы: Изд-во «Қазақ университеті», 2000. – 290 с.

2. Айдосов А.А., Айдосов Г.А., Заурбеков Н.С. Моделирование распространения вредных веществ в нижнем слое атмосферы со свободной верхней границей воздушной массы и оценка экологической обстановки окружающей среды / Промышленность Казахстана. – Алматы, 2007. – № 1(40). – С. 68–70.

3. Нигматулин Р.И. Методы механики сплошной среды для описания многофазных смесей // ПММ. – 1970. – Т.34, № 6. – С. 1097–1112.

4. Perminov V. Mathematical modeling of crown forest fire initiation // Lecture Notes in Computer Science. – 2003. – Vol. 2667. – P. 549–557.

5. Miyakoda K., Rosati A. One-way nested grid models: The interface condition and the numerical accuracy // Mon. Weather Review. – 1977. – Vol. 105. – P. 1092–1107.

References

1. Ajdosov A.A., Ajdosov G.A. Teoreticheskie osnovy prognozirovanija prirodnyh processov i jekologicheskoj obstanovki okruzhajushhej sredy. Kniga 1, Teoreticheskie osnovy prognozirovanija atmosfernyh processov i jekologicheskoj obstanovki okruzhajushhej sredy. Almaty: Izd-vo «Қазақ universiteti», 2000. 290 p.

2. Ajdosov A.A., Ajdosov G.A., Zaurbekov N.S. Modelirovanie rasprostranenija vrednyh veshhestv v nizhnem sloe atmosfery so svobodnoj verhnej granicej vozdushnoj massy i ocenka jekologicheskoj obstanovki okruzhajushhej sredy // Promyshlennost' Kazahstana. Almaty. 2007. no. 1(40). pp. 68–70.

3. Nigmatulin R.I. Metody mehaniki sploshnoj sredy dlja opisanija mnogofaznyh smesej // PMM. 1970. T.34, no. 6. pp. 1097–1112.

4. Perminov V. Mathematical modeling of crown forest fire initiation // Lecture Notes in Computer Science, Vol. 2667, 2003. pp. 549–557.

5. Miyakoda K., Rosati A. One-way nested grid models: The interface condition and the numerical accuracy // Mon. Weather Review. 1977. Vol. 105. pp. 1092–1107.

Рецензенты:

Абдылдаев Э.К., д.т.н., профессор, Алматинский технологический университет, г. Алматы;

Заурбеков Н.С., д.т.н., профессор, заведующий кафедрой «Информационные технологии», Алматинский технологический университет, г. Алматы.

Работа поступила в редакцию 06.10.2014.