

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЕ ВЕЩЕСТВА В НИЖНЕМ СЛОЕ АТМОСФЕРЫ

Абдула Ж., Галагузова Т.А., Аяпбергенова А.

Таразский инновационно-гуманитарный университет, Тараз, e-mail: tamara5024@mail.ru

В данной работе создана математическая модель, заключающаяся в использовании системно-методических методов исследования, позволившая оценить качество приземного слоя атмосферного воздуха. Предложен численный алгоритм и создано новое программное обеспечение, удовлетворительно описывающее процесс распространения загрязняющих веществ в атмосферном воздухе ограниченной территории, заключающемся в использовании алгоритма коррекции потоков, результаты которой коррелируют с данными. В работе рассмотрены двумерное распространение вещества аэрозоля в нижнем слое атмосферы, где цепочка его превращения из одного химического состояния в другое состоит из трех звеньев. Принимая во внимание, что свободное химическое вещество в воздухе (субстрат) сначала создают в ходе обратимой реакции воздушную смесь (комплекс), которая, в свою очередь, необратимо распадается, образуя вновь свободное химическое вещество и продукт. Таким образом, авторы показали не только систематизацию известных физико-химических свойств и закономерностей аэрозолей, но и необходимость более глубоких дальнейших исследований.

Ключи: математическая модель, программное обеспечение, численный алгоритм, использование алгоритма коррекции потоков, загрязняющие вещества в атмосферном воздухе

MODELING SPREADING MATERIAL IN UNDER-STRATUM OF ATMOSPHERE

Abdula J., Galaguzova T.A., Ayapbergenova A.

Taraz Innovation and Humanitarian University, Kazakhstan, Taraz, e-mail: tamara5024@mail.ru

In given work is created mathematical model, concluding in use system-methodical methods of the study, allowed to value the quality an приземного layer of the atmospheric air. It Is Offered numerical algorithm and is created new software, satisfactorily describing process of the spreading polluting material in atmospheric air of the limited territory, concluding in use the algorithm to correction flow, which results коррелируют with data. Two-dimensional spreading material aerosol are considered In work in under-stratums of atmosphere, where chain of his(its) conversion from one chemical condition in other consists of three sections. Taking into consideration that free chemical material in air (субстрат) сначала create in the course of reversible reaction air mixture (the complex), which, in turn, inconvertible disintegrates, forming newly free chemical material and product. Thereby, authors have shown not only systematization known physico-chemical characteristic and regularities of the aerosols, but also need of the more deep further studies.

Keywords: mathematical model, software, numerical algorithm, use the algorithm to correction flow, polluting material in atmospheric air

Примесь называется пассивной, если вплоть до выпадения на поверхность земли она не изменяется. Если же она в процессе распространения в атмосфере вступает в химические реакции с водяным паром или с другими компонентами атмосферы или же переходит из одного химического состояния в другое, то такую примесь будем называть активной.

Рассмотрим случай двумерного распространения вещества (аэрозоля) в нижнем слое атмосферы, где цепочка его превращения из одного химического состояния в другое согласно теории Михаэлиса-Ментен состоит из трех звеньев. Принимаем, что свободное химическое вещество в воздухе (субстрат) сначала создают в ходе обратной реакции воздушную смесь (комплекс), которая, в свою очередь, необратимо распадается, образуя вновь свободное химическое вещество и продукт [1].

Под активным понимается только такое количество реагентов, которое фактически

участвует в реакции. Если обозначить через s , e , st , p , соответственно концентрацию субстрата, химического вещества, смеси и продукта, то согласно закону действующих масс имеем

$$\frac{ds}{dt} = -k_1se + k_{-1}c, \quad \frac{de}{dt} = -k_1se + (k_1 + k_{-1})c,$$

$$\frac{dc}{dt} = k_1se - (k_1 + k_{-1})c, \quad \frac{dp}{dt} = k_2c \quad (1)$$

где k_1 , k_2 – скорости прямой и обратной реакции; k_{-1} – скорость реакции распада смеси.

Система (1) может быть записана с учетом диффузии, для описания которой используется баланс реагента ϕ :

$$\int_{(v)} \frac{d}{dt} dV + \int_{(s)} \vec{J}ndS + \int_{(v)} fdV = 0 \quad (2)$$

Здесь первый интеграл описывает скорость изменения реагента (ρ в объеме V),

второй интеграл – поток (за единицу времени) (p из V через поверхность dS), третий интеграл – скорость уменьшения (p в V в результате реакции), n – единичная внешняя нормаль к поверхности S . Из (2)

$$\frac{d}{dt} = -f + D \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right)$$

где D – коэффициент диффузии. Рассмотрим двумерный слой единичной толщины, где происходит диффузия химического вещества. В примеси имеется компонент воздуха который обратимо соединяется с веществом.

Обозначим через D_r и D_f коэффициенты диффузии компонента воздуха и реагента соответственно. Уравнения баланса для концентрации компоненты воздуха, реагента и смеси реагент – воздуха записываются в виде

$$\frac{dC}{dt} = f + D_r \Delta C, \quad \frac{dC_f}{dt} = -f + D_f \Delta C_f$$

$$\frac{dC_k}{dt} = f + D_r \Delta C_r, \quad \left(\Delta = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right)$$

где C_r и C_f – концентрации реагента и смеси воздух – реагент. Функцию согласно (1) можно представить в виде ($k_3 = 0$).

$$f = k_1 C_f C - k_{-1} C_r$$

Если учитывать перенос вещества течением воздуха по направлениям осей OX и OY со скоростями u и v соответственно, то

$$\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial x} + v \frac{\partial}{\partial y}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + f = D_r \Delta C, \quad (3)$$

$$\frac{\partial C_f}{\partial t} + u \frac{\partial C_f}{\partial x} + v \frac{\partial C_f}{\partial y} - f = D_a \Delta C_f,$$

$$\frac{\partial C_r}{\partial t} + u \frac{\partial C_r}{\partial x} + v \frac{\partial C_r}{\partial y} - f = D_a \Delta C_r$$

Система (3) описывает процесс распространения активной примеси с учетом диффузии, химической реакции и переноса вещества течением воздуха.

Иной подход к описанию перехода части аэрозольных соединений в другие формы (под действием химической реакции) предложен в работе Г.И. Марчука [2]. При этом механизм реакции перехода детально не рассматривается, а используется только последовательность звеньев цепочки превращения. Например, для трехзвенной цепочки в двумерном случае имеем

$$\frac{\partial A_1}{\partial t} + u \frac{\partial A_1}{\partial x} + v \frac{\partial A_1}{\partial y} + \delta_1 A_1 - \mu \Delta A_1 = F,$$

$$\frac{\partial A_2}{\partial t} + u \frac{\partial A_2}{\partial x} + v \frac{\partial A_2}{\partial y} + \delta_2 A_2 - \delta_1 A_1 - \mu \Delta A_2 = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial A_3}{\partial t} + u \frac{\partial A_3}{\partial x} + v \frac{\partial A_3}{\partial y} + \delta_3 A_3 - \delta_2 A_2 - \mu \Delta A_3 = 0$$

где A – коэффициент турбулентной диффузии; F – интенсивность источника появления аэрозольного соединения.

Если использовать уравнения кинетики обмена вещества между химическими реагентами в составе воздушной массы, где скорости обмена будут пропорциональны разности концентрации.

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_1}{\partial t} + u \frac{\partial A_1}{\partial x} + v \frac{\partial A_1}{\partial y} + \delta_{11} A_1 + \delta_{12} (A_1 - A_2) + \delta_{13} (A_1 - A_3) - \mu_1 \Delta A_1 &= F, \\ \frac{\partial A_2}{\partial t} + u \frac{\partial A_2}{\partial x} + v \frac{\partial A_2}{\partial y} + \delta_{22} A_2 + \delta_{12} (A_2 - A_1) + \delta_{23} (A_2 - A_3) - \mu_2 \Delta A_2 &= 0, \\ \frac{\partial A_3}{\partial t} + u \frac{\partial A_3}{\partial x} + v \frac{\partial A_3}{\partial y} + \delta_{33} A_3 + \delta_{31} (A_3 - A_1) + \delta_{23} (A_3 - A_2) - \mu \Delta A_3 &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

Системы уравнения (4) и (5) в отличие от 3 являются линейными, что существенно упрощает математическое описание процесса распространения и превращения аэрозольного соединения в атмосфере.

При расчете выбросов вредных веществ в атмосферу для каждого вещества, выбрасываемого источниками проверяется условие [3].

$$q_{\text{сум}} = \frac{I}{K_{\text{сд}}} \sum_j^n (q_{\text{нр},j} + q_{\text{ф},j}) = \frac{I}{K_{\text{сд}}} \sum_j \frac{C_{\text{нр},j} + C_{\text{ф},j}}{\text{ПДК}_j} < 1 \quad (6)$$

где $C_{\text{нр},j}$ – приземная концентрация j – вещества; $C_{\text{ф},j}$ – фоновая концентрация этого вещества.

В случае когда гигиеническое воздействие вредных веществ зависит от совместного присутствия группы веществ, обладающих эффектом «суммарного воздействия», введено дополнительное требование Минздрава:

$$q_{\text{сум},j} = (q_{\text{нр},j} + q_{\text{ф},j}) = \frac{C_{\text{нр},j} + C_{\text{ф},j}}{\text{ПДК}_j} < 1 \quad (7)$$

где $K_{\text{сд}}$ – коэффициент комбинации совместно гигиенического действия группы веществ.

Таким образом, не только систематизация известных физико-химических свойств и закономерностей аэрозолей, но и необходимость более глубоких дальнейших исследований аэрозоля как актуальную проблему в ряде смежных отраслей науки и техники. Наличие взвешенных примесей является нежелательным фактом и на определенном этапе возникает необходимость осаждения и извлечение того или иного количественного изменения, либо, наконец, ее полного или частично уничтожения.

Список литературы

1. Гран Х., Лейн В. Аэрозоли – пыли, дымы, туманы. – СПб., изд. Химия, 1999.
2. Марчук Г.Н. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – Москва, Наука, 2002.
3. Примак А.В., Щербань А.Н. Методы и средства контроля загрязнения атмосферы. – Киев, «Наумова думка», 1980.