

УДК 551.511

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СЕРОВОДОРОДА
ПРИ АВАРИЙНЫХ ВЫБРОСАХ В АТМОСФЕРУ**

Канд. физ. мат. наук А. Айдосов

В работе смоделировано распространение сероводорода в атмосфере при аварийных порывах трубопроводов и фонтанировании скважин на нефтегазодобывающих месторождениях.

Предпосылки к нейтрализации сероводородного облака. Поскольку жесткие условия, каковыми являются условия Карачаганакского нефтегазоконденсатного месторождения (далее КНГКМ) (высокое давление в устье скважин и в шлейфах, большая концентрация сероводорода, коррозионность пластовой смеси), не гарантируют безаварийную эксплуатацию месторождения, то представляют интерес химические методы борьбы с ядовитыми газовыми образованиями, способные существенно снизить в них концентрацию H_2S . Причем такой обычный прием, как сжигание в данном случае проблему не решает, так как в результате сгорания H_2S образуется примерно то же количество сернистого ангидрида - SO_2 , отравляющее воздействие которого не многим уступает сероводороду. С теоретической точки зрения проблема может быть решена путем распыления в ядовитом облаке специальных веществ, вступающих с H_2S в химическую реакцию, приводящую к выпадению сульфитов и не дающую побочного отравляющего эффекта. Для подтверждения формулированной теоретической посылки и точного определения состава нейтрализующих веществ требуются экспериментальные научно-исследовательские работы, в которых эффективность предложенного метода и его конкретные параметры (включая стоимость) были бы проверены в условиях, близких к реальным. Для такого рода работ могут быть использованы специальные павильоны, имеющиеся на сегодня в распоряжении учреждений, занимающихся близкими проблемами. При этом нет необходимости в полной имитации состава пластового газа, поскольку парафиносодержащие углеводороды нейтральны по отношению к иссле-

дуемой химической реакции, в силу чего в эксперименте достаточно будет воспроизводить концентрацию только сероводорода.

Математическая постановка и алгоритм решения задачи. Постановка задачи прогноза производится с ориентацией на распространение сероводорода при аварийных порывах трубопроводов и фонтанировании скважин на КНГКМ.

При мощных аварийных выбросах таких высокотоксичных загрязнителей как сероводород требование обеспечения экологической безопасности месторождения можно сформулировать в виде неравенство:

$$\tau_p < \tau_3 - \tau_M, \quad (1)$$

где τ_p - время на принятие природоохранного решения, включая время решения задачи прогноза; τ_3 - время распространения загрязнения; τ_M - время реализации природоохранных организаций (мероприятий). При решении задачи прогноза это основополагающее требование необходимо учитывать.

Район месторождения предварительно разбивается на квадраты. каждому из них ставится в соответствие индекс (это может быть число, или, например, двухмерный вектор). В самом общем виде решение задачи должно состоять из предупреждения: в какой момент времени тот или иной квадрат будет подвергнут опасному уровню загрязнения (превышение ПДК, двукратное превышение ПДК, n - кратное превышение ПДК).

Исходными данными для решения задачи являются место и мощность аварийного выброса, его продолжительность, кроме того, это числовая характеристика метеорологической ситуации (направление, скорость ветра, и т.п.). Здесь важно отметить, что исходные данные характеризуются зашумленностью, особенно это касается параметров источников выбросов.

При выборе подходящей математической модели процесса распространения газообразной примеси в атмосфере необходимо учитывать, что он объединяет в себе такие различные процессы как перенос ветром, турбулентная диффузия, поглощение и химическое превращение примеси. Процесс распространения примеси можно описать следующей дифференциальной моделью в частных производных [4]:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 u_i \frac{\partial q}{\partial x_i} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_i \frac{\partial q}{\partial x_i} \right) + \alpha q = f, \quad (2)$$

где $q(\tilde{x}, t)$ - определенная концентрация примеси в точке $\tilde{x} = (x_1, x_2, x_3)$ в момент времени t , $x \in \Omega \cup \partial\Omega$; $t \in (0, T)$; $\tilde{u} = (u_1, u_2, u_3)$ - вектор скорости ветра с составляющими вдоль осей координат x_1, x_2, x_3 соответственно; k_1, k_2, k_3 - коэффициенты турбулентной диффузии вдоль соответствующих осей координат; α - коэффициент интенсивности поглощения примеси атмосферой; $f(\tilde{x}, t)$ - обобщенная функция, характеризующая источники выбросов на местности.

В случае наличия нескольких точечных источников функция $f(\tilde{x}, t)$ аппроксимируется следующим выражением:

$$f(\tilde{x}, t) = \sum_{i=1}^3 Q_i(t) \delta(x - X_i^S),$$

где $Q_i(t)$ - мощность выброса i -го источника в t -ый момент времени; $X_i^S = (x_{1i}^S, x_{2i}^S, x_{3i}^S)$ - вектор координат i -го источника. Если источник является постоянно действующим (типичным примером могут служить трубы ТЭЦ), то $Q_i(t)$ можно представить в виде const. Для случаев аварийных выбросов такое представление, по-видимому, неприемлемо. Здесь, в зависимости от характера аварии, можно остановиться на одном из следующих трех вариантов, описанных в [3]:

1) экспоненциальный режим

$$Q(t) = M_0 \exp(-at),$$

где M_0 - начальный выброс; a - коэффициент интенсивности выброса;

2) последующее стационарирование выброса

$$Q(t) = M_{\max} [1 - \exp(-at)];$$

где M_{\max} - максимальная мощность выброса;

3) колебательный (пульсирующий) режим

$$Q(t) = \bar{M} + M \sin(2\pi t / \tau - \pi / 2);$$

где M - амплитуда выброса; \bar{M} - среднее интервала колебания выброса; τ - период.

Если обратиться к модели распространения, то можно констатировать, что у нас нет надежды получить в общем виде аналитическое решение уравнения (2). Но почему бы не сразу не приступить к его численному решению на современной быстродействующей ЭВМ. Причина невозмож-

ности этого кроется в самой природе турбулентного потока. В [1] показано, что исходя из масштаба длины Колмогорова, разрешение вычислительной схемы должно быть таково, чтобы можно было описывать поведение вихрей с размерами от 1 мм до 300 м. Естественно, что это не под силу ни одной современной ЭВМ, кроме того, здесь не следует забывать о необходимости выполнения неравенства (1). В этой ситуации решить задачу прогноза распространения, по-видимому, можно только путем разработки достаточно простой и эффективной математической модели этого процесса. Кроме того, необходимо учитывать еще одно требование, которое связано с особой опасностью сероводорода для жизни и здоровья людей. Суть его в том, что в процессе прогнозирования очень важно не пропустить опасные уровни загрязнения, пусть даже это иногда будет приводить к ложной тревоге.

Динамические модели распространения примесей в атмосфере. Рассмотрим несколько подходов к моделированию распространения примесей на примере конкретных математических моделей.

Методы численного моделирования атмосферных процессов. В данном разделе излагается структура и системная организация разрабатываемых в Вычислительном центре Сибирского отделения АН РФ под руководством В.В. Пененко моделей, ориентированных на решение задач контроля состояния и управления качеством атмосферы при антропогенных загрязнениях.

В ВЦ СО рассматривается комплекс моделей многоцелевого назначения, в котором не все модели равнозначны. Выделяется два уровня, реализующих тот или иной этап моделирования. К первому уровню относятся собственно модели физических процессов. Например, модели гидротермодинамики атмосферы различных пространственно-временных масштабов, модели переноса и трансформации примесей, различные способы параметризации и другие [2, 6]. Модели второго уровня представляют собой системную организацию, которая оперирует с моделями первого уровня, комплекс моделей задуман как инструмент для реализации исследовательских программ и решения практических задач.

Для реализации моделей второго уровня [1] и для решения задачи в целом используются сложные математические методы, в частности вариационные принципы в сочетании с методом расщепления, которые при

присущей им универсальности формального описания, позволяет учитывать и индивидуальные особенности физических постановок задач.

В информационных аспектах численного моделирования основными являются понятия функций состояния и параметров. Их физический смысл и различия между ними зависят от конкретной постановки задачи.

Функция состояния обозначается через φ_j , к ее числу относится и концентрация загрязняющих примесей. Вектор параметров обозначается через Y . В качестве параметров рассматриваются: коэффициенты уравнений, параметры области интегрирования D_t , сеточной области D_t^h , в области размещения наблюдательных систем D_t^m , начальные значения функций состояния, распределения и мощности источников тепла, влаги и примесей и др.

В оперативной форме математическая модель записывается с помощью операторного уравнения [4]

$$B \frac{\partial \varphi}{\partial t} + G(\varphi, y) = f(x, t), \quad \varphi \in Q(Dt), \quad y \in R(Dt), \quad (3)$$

где B - диагональная матрица, в которой все или часть элементов могут быть нулями; $G(\varphi, y)$ - нелинейный дифференциальный оператор матричной структуры; $Q(Dt)$ - пространство функций состояния, удовлетворяющих граничным условиям; $R(Dt)$ - область допустимых значений параметров; $f(x, t)$ - источники; D - область изменения пространственных переменных; $[0, t]$ - интервал изменения времени.

Модель переноса примесей в атмосфере с учетом процессов трансформации веществ турбулентного обмена и обменных процессов запишется:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \text{div}Cu - \text{div}_s \mu \text{grad}_s C - \frac{\partial}{\partial z} \nu \frac{\partial C}{\partial z} + A(C) = f_0(x, t); \quad (4)$$

где C - концентрация примесей; u - вектор скорости с компонентами u , v , w в направлении пространственных координат x ; t - время; μ , ν - коэффициенты турбулентности в горизонтальном и вертикальном направлениях; индексом отмечены операторы, действующие в горизонтальном направлении; $A(C)$ - оператор трансформации примесей; $f_0(x, t)$ - источник примесей.

Как уже было отмечено, уравнение типа (4) решается с помощью вариационных принципов в сочетании с методами расщепления с использованием итерационных процессов.

В качестве иллюстрации можно указать решение задачи нахождения положения и мощности источника примесей по данным измерений, проведенной численными методами в ВЦ СО АН РФ [7]. Решение задачи является многоступенчатым и достаточно сложным. Следует заметить также, что численный пример рассмотрен для стационарного случая.

Отметим, что в вычислительном центре СО АН РФ разрабатывается система автоматизации исследований, ориентированная в первую очередь на решение научно-исследовательских задач и обеспечение численных экспериментов, обработку результатов расчетов фактической информации. Пока в ее структуре не предусматривается подсистема оперативного сбора и накопления информации от измерительных систем, работающая в режиме реального времени, а предполагается, что требуемая для решения конкретных задач фактическая информация находится в информационной базе на технических носителях. Методы решения задач достаточно сложны, громоздки.

Исходными является известное дифференциальное уравнение в частных производных (2), описывающих процесс распространения примесей в атмосфере. По смыслу уравнения (2) и (4) являются аналогичными.

Для моделирования исследуемого процесса необходимо решить дифференциальное уравнение (2) в заданной пространственно-временной области $\Omega \times (0, t)$ с некоторыми граничными и начальными условиями. Поскольку пространственная область Ω не имеет четко выраженных границ, то ее можно считать прямоугольным параллелепипедом с гранями: S_H - нижняя (подстилающая) поверхность; S_b - верхняя граница области; S_{δ_i} ($i = \overline{1,4}$) - боковые грани области, при этом S_{δ} - вся боковая поверхность; $(0, t)$ - временной интервал.

Решение трехмерного уравнения (2), как известно, представляет значительные трудности, поэтому трехмерная задача разбивается на систему последовательно решаемых одномерных уравнений с помощью метода расщепления, предложенного в [4, 6].

На основании полученной дискретной системы уравнений и замеренных значений концентрации в отдельных точках, итерационным путем проводится оценка концентраций примеси во всех точках области Ω .

С помощью алгоритма субоптимальной фильтрации решается задача прогнозирования концентрации примеси, заключающаяся в получении оптимальной оценки концентрации q^{k+1} в момент времени t^{k+1} , где $k = 1, 2, \dots$ - длина шагов прогноза.

Распределение коэффициентов уравнения (2) u_i, k_i, α и мощности источников примеси Q_j производится с помощью решения задачи идентификации. Суть ее в следующем. Пусть y_j - значения измерений концентрации примеси в точках x_j^{u3} , сделанные в моменты времени t_j^{u3} , $j = \overline{1, M}$, M - число проведенных замеров. Пусть также $q(x_j^{u3}, t_j^{u3})$ - значения концентрации примеси, полученные решением задачи прогнозирования. Решением задачи будут значения коэффициентов u_i, k_i, α, Q_j , которые доставят минимум функционалу

$$J = \sum_{j=1}^M C_j (q(x_j^{u3}, t_j^{u3}) - y_j)^2, \quad (5)$$

где C_j - весовые коэффициенты, показывающие относительную важность (представительность) одних измерений перед другими.

Минимизация функционала (5) для дифференциального уравнения (2) проводится с помощью сопряженных функций Лагранжа для пространственно-распределенных систем.

Общий алгоритм исследуемого процесса представляется в следующей последовательности:

1. Вводятся дискретные данные измерений.
2. Производится оценка значений концентрации примеси в каждой точке дискретизации (дискретной сетки).
3. Решается задача прогнозирования значений концентрации примеси на T_{cek} времени вперед.
4. Задержка времени, T_{cek} .
5. Ввод замеренных концентраций примеси.

6. Оценка значений концентрации примеси на основе прогноза и введенных замеренных значений.

7. Вычисления значения функционала J .

8. Если J не более заданного значения ε , то считается, что идентификация не требуется.

9. Если $J > \varepsilon$, то производится идентификация параметров; и так до тех пор, пока не выполнится условие $J \leq \varepsilon$.

10. Если требуется прогноз для концентрации примеси на следующий интервал времени, то управление передается на п. 3, если нет, то алгоритм заканчивает свою работу.

Описанный процесс доведен до программной реализации [5].

Полуэмпирический подход к прогнозированию перемещения зон экстремально высокого загрязнения воздуха сильно действующими ядовитыми веществами (СДЯВ)

В случае аварии сначала определяется мощность выброса (кг/мин) как количество вредного вещества, поступающего в атмосферу в единицу времени:

$$M_a = \frac{M_c}{t_a};$$

где M_c (кг) - суммарный выброс; t_a (мин) - продолжительность аварийного выброса.

Для определения направления перемещения зоны заражения СДЯВ на плане местности от источника выброса ядовитых веществ проводится ось факела (следа движущегося облака) СДЯВ в направлении ветра и боковые границы зоны заражения.

Зона летальных (смертельных) концентраций, где концентрация q превышает пороговое значение q_n (т.е. $q \geq q_n$) при аварийных выбросах ограничена сектором, имеющим угловую ширину φ_n и глубину L_n . Центр окружности, ограничивающий сектор, совпадает с источником выбросов. Биссектриса сектора совпадает с осью факела и направлена вдоль средней за рассматриваемый период скорости ветра.

Зона поражающих концентраций (где $q_n \leq q < q_n$) имеет аналогичную форму, а ее размеры определяются параметрами φ_n и L_n .

Угловые размеры зон летальных и поражающих концентраций φ_n и L_n при устойчивом направлении ветра определяются в зависимости от скорости ветра u по таблице. Если в рассматриваемый период происходит изменение направления ветра, то соответственно этому предусматриваются изменения в построении боковых границ зоны поражения.

Значения глубины зон летальных и поражающих концентраций L_n и L_n определяются мощностью выброса M_2 , скоростью ветра и степенью устойчивости атмосферы. Полученные величины L_n и L_n уточняются по таблицам в зависимости от прогностической информации (продолжительности периода сохранения степени вертикальной устойчивости и разных скоростей ветра).

Ориентировочное время подхода зараженного воздуха к ближайшим рубежам (объектам) t_q (час) в зоне заражения определяется по формуле:

$$t_q = \frac{x}{v},$$

где x - расстояние (в км) от источника аварийного выброса до фиксированной точки местности внутри зоны летальных или поражающих концентраций; v - скорость переноса (км/ч) переднего фронта зараженного воздуха.

Если x не превосходит L_n , то в данной точке для моментов времени $t > t_q$ прогнозируется летальная концентрация, а если $L_n < x < L_n$, то в точке прогнозируется поражающая концентрация. Для более удаленных от места аварии (на 20 км и более) объектов учитываются изменения скорости ветра и степени устойчивости атмосферы[9].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Айдосов А. Вывод уравнений для давления во влажной атмосфере с оценкой роли турбулентной диффузии и модели, определяющие изменение давления. – Журнал «Поиск», Алматы, № 2, 2000 г. - С.199-206.
2. Айдосов А. Моделирование прогностического уравнения атмосферных процессов с учетом влияния влажности на изменение ее параметров. – Журнал «Поиск», Алматы, № 6, 1999 г. - С.234-241.
3. Айдосов А. Прогнозирование распространения сероводорода при аварийных выбросах в атмосферу. - Материалы IV Международной науч-

но-технической конференции «Новое в охране труда и окружающей среды», 11-12 октября 2000 г., Алматы, 2000. - С.228-232.

4. Айдосов 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. - Изд-во «Сазај университеті», Алматы, 2000 г. - 290 с.

5. Айдосов А., Заурбеков Н.С. Моделирование численного анализа и прогноза аномалии атмосферных процессов с использованием новой информационной технологии. - Материалы III Казахстано-российской научно-практической конференции «Математическое моделирование научно – технических и экологических проблем в нефтегазодобывающей промышленности», Алматы, 2000. - С. 12-16.

6. Айдосов А., Кырыкбаев Б., Заурбеков Н.С. Модели процессов приземного слоя атмосферы. - Труды международной научно - практической конференции “КазНТУ – образованию, науке и производству Республики Казахстан”, Алматы, 1999г. – С. 255-258.

7. Бакирбаев Б. Моделирование турбулентного пограничного слоя атмосферы с незакрепленной верхней границей с учетом фазовых переходов влаги. - Численные методы в задачах физики атмосферы и охраны окружающей среды. – Новосибирск, ВЦ СО АН СССР, 1985. – С. 44-59.

8. Берлянд М.Е. Состояние и пути совершенствования, нормирования, контроля и прогноза загрязнения атмосферы. – АН СССР, ОВМ. – Препринт № 59. –М., 1985. – 50 с.

9. Пененко В.В., Алоян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды. – Новосибирск, Наука, 1985. – 254 с.

Казахская Головная Архитектурно - Строительная Академия

АПАТ БАРЫСЫНДА КҮКІРТТІ СУТЕГІНІҢ АТМОСФЕРАДА ТАРАЛУЫН БОЛЖАМДАУ

Физ. - мат. ғылымд. канд. А. Айдосов

Жұмыста тосыннан нефть пен газ тасымалдау трубаларының жарылуы мен скважиналардан атқылауы барысында күкіртті сутегінің атмосферада таралу моделі қарастырылған.