

УДК 501.509.312

**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ  
ОКРУЖАЮЩУЮ СРЕДУ ХРОМСОДЕРЖАЩИХ ВЕЩЕСТВ**

Канд.техн.наук  
Кан.физ-мат.наук  
Докт.техн.наук

М.С.Сахиев  
Б.Бакирбаев  
В.К.Бишimbасов

*В работе рассмотрены загрязнение атмосферного воздуха при выбросах вредных веществ, а также задача управления качеством окружающей среды на основе модели переноса и турбулентной диффузии примесей.*

Деятельность химических предприятий приводит к интенсивному увеличению промышленных отходов, поступающих в окружающую среду. Существенная часть этих выбросов прямым или косвенным образом поступает в гидрологическую систему Земли и в конечном счете в моря и в закрытые водоемы, находящиеся вблизи территории химических предприятий.

Например, химические комбинаты, производящие минеральные дубители для кожевенной промышленности выбрасывают в окружающую среду соединения хрома, вредно действующие на организм человека и водообитателей.

Большинство соединений хрома вредны, а соединения шестивалентного хрома ядовиты. Проникая в кожу, соединения шестивалентного хрома разрушают белковые вещества клетки, вызывая язвы. Вдыхание пыли и испарений, содержащих соединения хрома, приводит к поражению слизистой оболочки носа и к прободению хрящевой перегородки [1].

Развитие химической промышленности требует выяснения оптимальных условий размещения новых цехов и комбинатов и технологических ограничений на стоки, загрязняющие водные бассейны (моря, озера, заливы и т.д.) с таким расчетом, чтобы загрязнение прибрежных зон было минимальным.

Большие возможности в улучшении качества воды связаны с оптимизацией режима работы химических предприятий.

Для определения оптимальных режимов необходимо располагать информацией о полях концентраций вредных веществ, создаваемых источниками загрязнения, затратах на снижение мощности выброса для

каждого из источников и ущербе, наносимом загрязнениями окружающей среде.

Эффективность управления режимом работ источников загрязнения с учетом санитарно-гигиенических и социальных требований к качеству воды может быть определена по общим экономическим параметрам, направленным на уменьшении величины выброса гидрозолей. Такие модели в общем виде рассмотрены в работах [1-3].

В данной работе рассматриваются загрязнения атмосферного воздуха при выбросах вредных веществ, в частности, соединений хрома, а также задача управления качеством окружающей среды на основе модели переноса и турбулентной диффузии примесей. Для различных стратегий управлений ищутся оптимальные режимы работы источников загрязняющих примесей. В качестве критериев оптимальности выбираются критерии минимальной стоимости регулирования, либо минимальной загрязненности заданных подобластей.

Рассмотрим эволюцию распространения примесей, когда происходит выброс химическим комбинатом хромсодержащих веществ в атмосферу. В атмосфере хромсодержащие соединения, а также другие примеси могут взаимодействовать с парами воды воздуха, образуя продукты гидролиза.

В области G в точке A(x,y) размещено химическое предприятие, выбрасывающее на высоте Z=h аэрозольные компоненты различных видов. Пусть это будут  $a_1, a_2, \dots, a_n$ . Они распространяются в атмосферу над данным регионом, частично осаждаясь на поверхности и загрязняя окружающую среду. В процессе переноса и турбулентной диффузии часть таких аэрозольных соединений в результате химических реакций в атмосфере переходят в другие формы [3]. Так, цепочка превращений может быть следующей :

$$a_{11} \rightarrow a_{11} \rightarrow a_{12} \rightarrow \dots \text{ и соответственно } a_2 \rightarrow a_{21} \rightarrow a_{22} \rightarrow \dots$$

Для определенности будем считать, что цепочка превращений аэрозоля состоит из двух звеньев. Тогда приходим к задаче:

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{v} \phi_1 + (\sigma + \sigma_1) \phi_1 - \operatorname{div}_s \mu q \operatorname{grad}_s \phi_1 - \frac{\partial}{\partial Z} v \frac{\partial \phi_1}{\partial Z} = f(\bar{x}, t) \quad (1)$$

$$\frac{\partial \phi_2}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{v} \phi_2 + \sigma \phi_1 - \sigma \phi_2 - \operatorname{div}_s \mu q \operatorname{grad}_s \phi_2 - \frac{\partial}{\partial Z} v \frac{\partial \phi_2}{\partial Z} = 0 \quad (2)$$

$$\text{где } \phi_j=0 \text{ при } t=0 \quad (3)$$

$$\phi_j=0 \text{ при } y \rightarrow \pm \infty, x \rightarrow \pm \infty, t \geq 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial \phi_j}{\partial z} = \alpha_j \phi_j \text{ при } z = z_0, t \geq 0 \quad (5)$$

$$\phi_j=0 \text{ при } Z=H, t \geq 0, j=1,2 \quad (6)$$

Компоненты вектора скорости и связаны между собой соотношением неразрывности:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (7)$$

где  $f_1 = Q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0), \vec{r}_0 = \vec{r}_0(x_0, y_0, h), \sigma_1 = \sigma + s_1$   
 $0 \leq t \leq T$

Задача (1)-(6) решается численными методами, описанными в [2,5].

При численном моделировании задач охраны окружающей среды одним из основных этапов является решение прямой задачи, с целью выяснения механизма распространения загрязняющих примесей от действующих источников. Кроме того, при решении некоторых оптимизационных задач, в частности, связанным с возможным размещением химических предприятий с соблюдением санитарных норм загрязнения для экологически значимых зон, удобно применить сопряженные уравнения [1-2]. Поэтому при численном решении таких задач необходимо, чтобы конечно-разностные аппроксимации прямой и сопряженной задач были согласованы. Такие взаимосвязанные конечно-разностные аппроксимации можно получить из интегрального тождества, построенного на вариационно-разностном принципе. [4].

Для получения конечно-разностной аппроксимации задачи (1)-(5) воспользуемся методом суммарных тождеств [4]. Для этого умножим уравнение (1)-(5) на произвольный вектор-функцию  $\varphi_1, \varphi_2$ . Далее с помощью интегрирования по частям приведем слагаемые в полученном интегральном тождестве к аппроксимированному виду, что позволит, в частности, без дополнительных преобразований получить при  $\varphi_1 = \varphi_1^*$  уравнения для поной энергии исходной системы. Примеры построения такого рода тождеств приведены в работах [4].

Аппроксимируя полученное интегральное тождество суммарным тождеством с единообразной аппроксимацией членов, содержащих  $\varphi_1 = \varphi_1^*, \varphi_2 = \varphi_2^*$ , автоматически получим это свойство в конечно-разностном виде. Записав условие стационарности полученного суммарного функционала при произвольных и независимых вариациях функции  $\varphi_1, \varphi_2$  в узлах сеточной области, придем к системе конечно-разностных уравнений. Разностная аппроксимация задачи по времени строится на основе расщепления по физическим процессам [2].

Перейдем к численному моделированию процесса распространения соединений хрома, подвергающегося гидролизу под влиянием водяного пара. Предположим, источник с эффективной высотой 60 м расположен в центральной части расчетной области и интенсивно выбрасывает в атмосферу ядовитый газ в течении 90 минут. После этого источник отключается. Рассмотрим задачу распространения ядовитого газа, целью которых является оценка физической стороны взаимодействия облака примесей с локальными атмосферными процессами,

развивающимися на термически и орфографически неоднородной поверхностью.

В расчетах компоненты вектора скорости и характеристики приземно-пограничного слоя получены с помощью модели локальных атмосферных процессов [6]. В излагаемом примере горизонтальные коэффициенты турбулентного обмена были взяты постоянными  $k \cdot \mu = 250$  м<sup>2</sup>/с, а вертикальные характеристики турбулентности рассчитывались из уравнения баланса энергии [2]. Остальные входные параметры модели полагались такими:

$x=y=40$  км,  $Z_0=0,01$  м,  $\Delta t=120$  с,  $\Delta x=\Delta y=500$  м,  $U_\phi=3$  м/с,  $V_\phi=0$ ,  $\sigma_i=0,05$ ,  $\bar{\sigma}_i=0$ ,  $\alpha_j=0,03$ ,  $Q=12$  кг/с.

Рассматривается термически неоднородная область, которую с севера на юг пересекает водная поверхность, в центре которой находится остров. В западной части расположен источник высотой 60 м, который выбрасывает в атмосферу ядовитый газ в течении 1,5 часов. Выбор пространственных масштабов, задаваемых в модели, определяется необходимостью очертить зону ближних выпадений при распространении выбрасываемого в атмосферу газа на полигоне 40x40 км<sup>2</sup>. Из-за контраста температур между водой и сушей возникает регулярная циркуляция, а наличие острова дополнительно стимулирует образование восходящих и нисходящих потоков, которые влияют на перенос и диффузию газов в атмосфере. В этом случае, подъем факела соединений хрома происходит до высоты 300-400 м, где наблюдаются концентрации  $In\phi_1 \approx 1,2 \div 0,7$ . Меньшие значения концентрации  $In\phi_1 \approx 0,7$  достигают высоты 1,2 км. Под действием влаги, испаряющейся с поверхности воды, усиливается гидролиз соединений хрома на высоте  $Z=2$  м достигает  $In\phi_2 \approx 0,65$ .

Перемещаясь по направлению фронтового ветра, соединения хрома попадают в нисходящие вертикальные потоки под влиянием острова. Это приводит к образованию локального максимума примесей в районе западного берега острова. Над водной поверхностью ветер несколько меняет направление, что приводит к смещению зоны локального максимума (рис.1).

В результате 1,5 часовой эволюции факела примеси по ветру распространяются на 15-20 км, нанося ощутимый уровень загрязненности в приземном слое атмосферы.

В связи с распределением трудовых ресурсов химические предприятия обычно сооружаются в окрестности водоема или рек. Это обстоятельство накладывает особые ограничения на размещение объектов, нарушающих экологические равновесия.

Предположим, что все химические предприятия в районе уже существуют и выбрасывают в окружающую среду заданное количество вредных примесей. Задача состоит в определении для каждого

предприятия такого режима, чтобы суммарное газовое их загрязнение от вредных промышленных выбросов не превышало допустимых санитарных норм и чтобы общая экологическая нагрузка на всю акваторию за счет ее загрязнения была минимальной или в пределах глобальных санитарных норм. В то же время существенно занижать суммарные выбросы нельзя, поскольку это приведет к снижению экономических показателей деятельности комбинатов.

Пусть в ограниченной области  $G$  находится  $K$  источников примеси интенсивности  $Q_i$ ,  $i=1, K$  и для каждого из них задана функция  $G_i(e_i)$  определяемая стоимостью снижения величины выброса от  $i$ -го источника на  $e_i$ ,  $0 < e_i < E_i < Q_i$ . Предположим, что все примеси нейтральны, т.е. не взаимодействуют с другими компонентами выброса, и есть  $N < K$  управляемых источников выбросов. Сформулируем следующую оптимизационную задачу [1,2,5].

Найти вектор, доставляющий минимум суммарной функции стоимости

$$G(\vec{e}) = \sum_{i=1}^N G_i(e_i) \rightarrow \inf_{\vec{e} \in E} \quad (8)$$

при ограничениях

$$\varphi(\vec{e}, \vec{x}) \leq R, \vec{x} \in D \quad (9)$$

Здесь  $\varphi(\vec{e}, \vec{x})$  - средняя концентрация загрязняющих веществ за определенный промежуток времени в точке  $T$  при уменьшении мощности источника на векторе  $R$  - предельно допустимая концентрация загрязняющих веществ в области.

Для определения поля концентрации, создаваемого  $i$ -ым источником единичной мощности  $w_i(x,t)$  воспользуемся уравнением турбулентности диффузии [1,2].

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \psi_i + p \psi_i = \Delta \psi_i + f_i(\vec{x}, t) \quad (10)$$

С краевым и начальным условием:

$$\begin{aligned} \nu \frac{\partial \psi_i}{\partial Z} + \beta \psi_i &= 0 \text{ при } Z = 0 \\ \nu \frac{\partial \psi_i}{\partial Z} &= 0 \text{ при } Z = H \end{aligned} \quad (11)$$

$$\psi_i|_{s=0} = 0, \psi_i|_{t=0} = 0 \quad (12)$$

В силу линейности задачи (10)-(12) суммарное поле концентрации  $\psi$ , созданное всеми источниками, определяется выражением:

$$\varphi(\vec{x}, \vec{e}) = \Phi(\vec{x}) + \sum_{i=1}^N (Q_i - e_i) \bar{\psi}_i(\vec{x}) \quad (13)$$

$$\bar{\psi}_i(x) = T^{-1} \int_0^1 \psi_i(x_i, t) dt, \quad i = 1, N$$

Подставляя выражение (13) в (8), получим задачи математического программирования:

$$G(\vec{e}) = \sum_{i=1}^N G_i(e_i) \rightarrow \inf_{\vec{e} \in E} \quad (14)$$

$$\Phi(\vec{x}) + \sum_{i=1}^N (Q_i - e_i) \bar{\psi}_i(\vec{x}) \leq R, \quad \vec{x} \in D \quad (15)$$

Если функция стоимости  $G_i(e_i)$  неубывающая, для решения задачи (14)-(15) могут использоваться методы выпуклого программирования [7,8]. Как показано в [1] функции стоимости регулирования источников  $G'(< ?, )J = IJV$  с достаточной для практических нужд точностью, могут быть выбраны в виде кусочно-линейных зависимостей.

Учитывая условия выбросов, проводилось объединение мелких источников, в результате чего получено 3 агрегированных источника, характеризуемых некоторыми средними величинами. Параметры источников брались таковыми:  $Q_1=100$ ,  $Q_2=90$ ,  $Q_3=80$ ; координаты источников:  $x_1=(16,31,20)$ ,  $x_2=(16,16,20)$ ,  $x_3=(31,16,30)$ . Охранная область  $Q$  - интенсивность источника. Пусть функция стоимости  $G=1,3$ .

На двух из них предполагается достичь степени очистки 80% при затратах на 1 т уловленного загрязняющего вещества 2,5 усл.ед. После определения поля концентрации в трех узлах сеточной области получены значения концентраций загрязняющих веществ, превышающие предельно допустимые (ПДК), которые использовались при решении задач управления выбросами вредного вещества. В этом случае мы решаем задачу оптимизации следующего вида:

$$G(\vec{e}) = 25(e_1 + e_2) + 1,5e_3 \rightarrow \inf_{\vec{e} \in E} \quad (16)$$

при ограничениях:

$$\sum_{i=1}^3 (Q_i - e_i) \frac{\phi_{ik}}{Q_i} \leq 10^{-2}, k = 1, 3 \quad (17)$$

$$0 \leq e_i \leq 0,80, \quad i = 1, 2; 0 \leq e_3 \leq 0,85Q_i \quad (18)$$

Решая задачу линейного программирования по известным методам находим минимум суммарной функции стоимости

$$G(\vec{e}) = \inf_{\vec{e} \in E} G(\vec{e}) = 7,14 \text{ усл.ед.}$$

Замечание. Поскольку поступление необходимых для достижения ПДК средств на снижение выбросов происходит поэтапно (в течении нескольких лет), рассмотрим промежуточные задачи об оптимальном распределении имеющихся на данный момент ресурсов. Тогда нам придется решить задачу:

$$I(\vec{e}) - \sum_{k,i} \frac{\varphi_{i,k}}{Q_i} (Q_i - e_i) \rightarrow \inf_{\vec{e} \in E} \quad (19)$$

при условии

$$25(e_1 + e_2) + 1,5e_3 \leq V \quad (20)$$

$$0 \leq e_i \leq 0,80, i = 1,2; 0 \leq e_3 \leq 0,85Q_i \quad (21)$$

где  $V$ - запланированная на некоторый ближайший период времени сумма затрат на снижение выбросов загрязняющего вещества. Расчеты проводились для двух значений  $V$ :

$$V_1 = \frac{1}{5} G(\vec{e}^*)$$

$$V_2 = \frac{2}{3} G(\vec{e}^*)$$

где  $\vec{e}^*$  - оптимальный вектор для задачи (17)-(18). Результаты этих расчетов приведены в таблице 1.

Таблица 1

Источники	Относительное снижение загрязняющих веществ (усл.ед.)		
	Задача (17)-(18)	$V_1$	$V_2$
1	0,8	0	0,65
2	0,85	0,87	0,91
3	0,85	0,6	0,74

В сформулированной задаче решение зависит от соотношения между вкладом источника в загрязнение охранной области и стоимостью уменьшения его интенсивности. Поскольку в задаче функции стоимости

регулирования  $G_i$  были выбраны одинаковыми, их решения почти одинаковы и определяются по относительному вкладу  $\phi_{ik}$  источника в загрязнение выбранной области. В первую очередь подлежат регулированию источники, дающие наибольший вклад в загрязнение области. Затем, если позволяют ресурсы, снижается мощность источников с меньшим вкладом.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Позин М.Е. Технология минеральных солей. - Л., Химия, 1970.- 625 с.
2. Пененко В.В., Рапута В.Ф. Некоторые модели оптимизации режима работы источников загрязнения атмосферы. / Метрология и гидрология. - 1983. - №2.- С.59-68.
3. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. - М., 1982. - 314 с.
4. Guastafson S.A., Kortanck K.O. A comprehensive Approach to air Quality planning: Monitoring Networks, Real time interpolation. Luxenburg, 1979.- p.1-30.
5. Пененко В.В. Методы моделирования атмосферных процессов. - Л., Гидрометеоиздат, 1981. - 81 с.
6. Бакирбаев Б., Скороходов А.А. Численное моделирование загрязнения территории КАТЭК-а планируемыми энергетическими предприятиями.// Математическое моделирование гидродинамических процессов и загрязнения атмосферы. -Новосибирск, 1998. - С.29-43.
7. Бакирбаев Б. Моделирование распространения седimentирующих примесей в орографически и термически неоднородном слое атмосферы. //Вестник КазГУ, серия математическая. - Алматы, 1993. - С.121-128.
8. Еремин И.И., Астафьев Н.Н. Введение в теорию линейного и выпуклого программирования. - М., Наука, 1976. - 319 с.
9. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. - М., Наука, 1983. - 289 с.

Таразский государственный университет им.М.Х.Дулати

## **ҚОРШАҒАН ОРТАНЫ ЛАСТАЙТИН ХРОМ ҚОСЫЛЫСТАРЫНЫң ТАРАЛУЫН МОДЕЛДЕУ**

Техн.ғыл.канд.  
Физ-мат.ғыл.канд.  
Техн.ғыл.докторы

М.С.Сахиев  
Б.Бакірбаев  
У.К.Бишімбаев

Бұл жұмыста зиянды заттардың атмосфераның ауаны ластауы, сонымен қатар қоспаларды тасымал моделі мен турбелентті диффузия негізінде қоршаган ортанның сапасын реттеу сұрақтары қаралған.