

Интернет-журнал «Наукovedение» ISSN 2223-5167 <http://naukovedenie.ru/>

Том 8, №5 (2016) <http://naukovedenie.ru/index.php?p=vol8-5>

URL статьи: <http://naukovedenie.ru/PDF/65TVN516.pdf>

Статья опубликована 10.10.2016.

Ссылка для цитирования этой статьи:

Матвеев Ю.Н., Масленников Б.И., Карельская К.А., Стукалова Н.А. Математическое моделирование процессов распространения загрязняющего вещества в почвогрунтах и атмосфере при его аварийном разливе // Интернет-журнал «НАУКОВЕДЕНИЕ» Том 8, №5 (2016) <http://naukovedenie.ru/PDF/65TVN516.pdf> (доступ свободный). Загл. с экрана. Яз. рус., англ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-29-07970 офи_м

УДК 519.711.3

Матвеев Юрий Николаевич

ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет», Россия, Тверь¹
Доктор технических наук, профессор
E-mail: matveev4700@mail.ru

Масленников Борис Иванович

ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет», Россия, Тверь
Доктор технических наук, профессор
E-mail: bimnew@yandex.ru

Карельская Катерина Александровна

ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет», Россия, Тверь
Кандидат технических наук, доцент
E-mail: kak69@yandex.ru

Стукалова Наталия Александровна

ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет», Россия, Тверь
Кандидат технических наук, доцент
E-mail: nast77@mail.ru

**Математическое моделирование процессов
распространения загрязняющего вещества в почвогрунтах
и атмосфере при его аварийном разливе**

Аннотация. При решении задач управления по ликвидации чрезвычайных ситуаций, связанных с локальными выбросами в атмосферу и в почву загрязняющих веществ, важной является прогнозная оценка распространения вредных веществ в почве и в воздушной среде.

Современные работы, касающихся этих вопросов, посвящены, в основном, исследованию различных техногенных источников по характеру выбросов и по их объемам. При этом задачи сформулированы в виде систем дифференциальных уравнений, как правило, нелинейных. Решить их можно аналитически – путем введения упрощающих допущений, при этом возможны значительные неточности расчета распространения загрязняющего вещества. Другим вариантом решения является машинный метод. Но в этом случае главным недостатком может быть ограниченность машинного ресурса.

¹ 170023, г. Тверь, проспект Ленина, д. 25

Авторами проведены аналитические исследования моделирования процесса распространения загрязняющего вещества в атмосфере и почвогрунтах в случае аварийной ситуации. В качестве загрязнителя рассматривается достаточно легко испаряемая жидкость.

В работе приводятся дифференциальные уравнения переноса для задачи аварийного разлива загрязняющего вещества на ограниченной площади почвы с заданным ветровым полем.

Исследование с использованием математической модели процесса распространения загрязняющего вещества в почве и в воздушной среде при возникновении аварийной ситуации возможно только при использовании современных средств вычислительной техники. Поскольку модель является сложной, а результаты моделирования должны быть представлены в кратчайшие сроки, перспективным для решения такой задачи является применение распределенных гетерогенных вычислительных систем.

Ключевые слова: математическое моделирование; аварийные ситуации; загрязняющие вещества; вредные выбросы; распространение вещества; прогнозная оценка; системы нелинейных дифференциальных уравнений; Гауссова модель; вычислительные ресурсы; распределенные системы

В литературе имеется значительное количество работ, посвященных математическому моделированию процесса распространения загрязняющих веществ в атмосфере и почвогрунтах, в которых рассматривается некоторая группа определяющих факторов либо предлагается свой подход к решению поставленных задач.

Задачи, решаемые в большинстве современных исследований, касающихся вопросов, связанных с локальными выбросами в атмосферу и в почву загрязняющих веществ, исследуют различные техногенные источники по характеру выбросов и по их объемам от дизельных установок до крупных промышленных предприятий [1-4], поступление загрязняющих веществ от которых носит перманентный или периодический характер.

Решение этих задач, сформулированных в виде систем дифференциальных (как правило, нелинейных) уравнений предлагается проводить либо аналитически – путем введения упрощающих допущений, либо машинным методом. Первый путь предполагает иногда значительные неточности расчета распространения загрязняющего вещества, а главным недостатком второго пути часто может быть ограниченность машинного ресурса.

В задачу нашего исследования входили выбор и анализ математической модели миграции и аккумуляции загрязняющего вещества в почвогрунтах и в атмосфере, когда эти процессы начинаются практически одновременно, после разлива загрязняющего вещества в открытый грунт. Такие ситуации, связанные с разливом вредных и ядовитых веществ на поверхность земли, возможны в процессе транспортировки и хранения и связаны, например, с разрушением трубопроводов перекачки и подачи веществ в промежуточные емкости; с авариями при транспортировке железнодорожным и автомобильным транспортом.

Особо следует выделить загрязняющие вещества, имеющие гетерогенный молекулярный состав, такие как нефть и нефтепродукты, другие смеси жидких углеводородов, суспензии, коллоиды и т.п.

Процесс испарения таких веществ вызывает увеличение их плотности и вязкости, что необходимо учитывать при математическом моделировании процесса миграции и аккумуляции их в почвогрунтах [6].

Для математического описания диффузионно-фильтрационного просачивания нефти в почве [4, 5] было применено одномерное нестационарное уравнение:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial w}{\partial x} \left[D(w) \frac{\partial w}{\partial x} \right] - \frac{\partial K(w)}{\partial x};$$
$$H = H_0 - \int_0^z w dx, \quad (1)$$

где: t – время, x – вертикальная координата (ось Ox направлена вниз от поверхности почвы), w – относительное массовое содержание нефти в почве (г/кг), X – глубина зоны аэрации, H, H_0 – значения w на указанных глубинах, соответственно в моменты времени t и $t = 0$, K и D – коэффициенты фильтрации и диффузии нефти в почве.

Для оценки величины коэффициентов были использованы следующие выражения [6]:

$$K = K_B \left[\frac{w - w_0}{\sigma - w_0} \right]^{3,5} \frac{v_B}{v_H}, \quad D = D_B \frac{v_B}{v_H}, \quad (2)$$

где: K_B – коэффициент фильтрации воды в условиях полного насыщения слоя почвы, σ – общая пористость почвы, v_B и v_H – кинематические коэффициенты вязкости воды и нефти, соответственно, D_B – коэффициент диффузии воды, w_0 – относительная масса связанной воды в нефти.

В качестве начальных и граничных условий были выбраны соотношения:

$$t=0, w(0,x)=0; x=0, w(t,0) = \begin{cases} \sigma & \text{при } H > 0 \\ w_0 & \text{при } H = 0 \end{cases} \quad (3)$$

для $x = X, \frac{\partial w}{\partial x} = 0$.

Прогнозная оценка распространения вредных веществ в почве и в воздушной среде является актуальной для решения задач управления по ликвидации сложившейся чрезвычайной ситуации.

При разливе вредное вещество, представляющее собой, например, водный раствор кислоты или щелочи или какого-либо органического соединения, смеси жидких органических соединений и т.п., распределяется на определенной площади поверхности почвы.

Процесс удаления вредного вещества с площади разлива одновременно будет происходить путем конвективной диффузии – движением фаз в результате внешних воздействий, таких как ветер в атмосфере, осадковые и грунтовые воды в почвогрунтах, изменения температуры и пр. В жидкой или газообразной среде – это основной вид диффузии, который происходит за счет перемещения внутри данной фазы конвективных потоков, несущих диффундирующее вещество.

Почвы в своем составе имеют как минеральные, так и органические составляющие. Благодаря такому составу они могут активно взаимодействовать с различными загрязняющими веществами, такими как аммиак, хлор, различные минеральные и органические кислоты и основания, жидкие углеводороды, выступая в качестве сорбента для техно- и биогенных загрязнений. Органоминеральный комплекс почв, обладая определенной сорбционной емкостью, способствует аккумуляции загрязняющих веществ. Глубина

почвенного слоя зависит от многих факторов (географических, климатических и др.) и может составлять от 0,2 до 1,0 м.

Через почвенный слой происходит медленное проникновение загрязняющего вещества, в том числе и с осадковыми водами, к потоку, который формируется за счет притока поверхностных и подземных вод. В процессе миграции загрязняющее вещество подвергается продольной и поперечной гидродисперсии, химической и биохимической трансформации.

Толщина почвенного слоя намного меньше горизонтальных размеров разлива загрязняющего вещества. Поток в вертикальной плоскости двумерный, основной конвективно-диффузионный перенос ингредиентов в нем происходит в вертикальном направлении – вдоль оси OX , а вдоль оси OY – за счет поперечной гидродисперсии [1-3].

Учитывая приведенные выше допущения, миграцию загрязняющих веществ в почвогрунтах можно описать уравнением

$$n \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial N_1}{\partial t} - \frac{\partial N_2}{\partial t} \quad (4)$$

с начальными и граничными условиями

$$C(x, y, 0) = C_E(x, y); \quad C(0, y, t) = C_E; \quad C\left(\frac{0, B}{2, t}\right) = \frac{qC_c}{VH} \delta\left(y - \left(\frac{B}{2}\right)\right) = C_\infty$$
$$\frac{\partial C(L, y, t)}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial C(x, 0, t)}{\partial y} = 0; \quad \frac{\partial C(x, B, t)}{\partial y} = 0 \quad (5)$$

Дифференциальное уравнение (4) необходимо дополнить уравнением равновесного массообмена

$$N_1(x, y, t) = \frac{n_a}{\alpha} C(x, y, t) \quad (6)$$

и уравнением динамики трансформации (связывания, распада) загрязняющего вещества

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} = KC, \quad (7)$$

где: $C(x, y, t)$, $C_E(x, y, t)$, C_∞ – соответственно массовая концентрация загрязняющего вещества в фильтрате, естественная концентрация и концентрация у места разлива; D_x , D_y – коэффициенты конвективной диффузии, учитывающие продольное и поперечное рассеяние загрязняющего вещества в потоке, V – скорость фильтрации; K – коэффициент трансформации; H – средняя глубина; $n = n_a(1+\alpha)/\alpha$ – эффективная пористость (n_a – активная пористость, α – коэффициент распределения вещества); N_1 , N_2 – массовое содержание загрязняющего и

разложившегося вещества соответственно; $\delta\left(y - \frac{B}{2}\right)$ – дельта-функция Дирака.

Введение этой функции предполагает, что поток загрязненных вод поступает в локальной точке с координатами $(x=0, y=B/2)$, а затем во времени распределяется соответствующим образом.

Данная математическая модель достаточно надежно отражает физическую сущность моделируемых явлений, а также позволяет определить среднее значение концентрации исследуемого вещества в зоне разлива.

При условии малой составляющей поперечного рассеивания в почвогрунтах отток загрязнений вдоль оси ОУ пренебрежимо мал. Поэтому расчет миграции загрязнений можно проводить, применяя одномерную модель ($D_x=D$, $D_y=0$). В этом случае получаются менее точные расчеты аккумуляции и трансформации загрязняющего вещества.

Математическая модель будет иметь вид:

$$n \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - KC$$

$$C(x,0) = C_\phi; C(0,t) = C_H; C(\infty,0) = C_\phi. \quad (8)$$

Точное аналитическое решение данной задачи описывается выражением (9).

$$\bar{C}(x,t) = \frac{C(x,t) - C_\phi}{C_H - C_\phi} = \frac{1}{2} \left[e^{Z_1} \operatorname{erfc} \left(\frac{x + Vt \sqrt{1 + \varepsilon}}{2\sqrt{Dt}} \right) + e^{Z_2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - Vt \sqrt{1 + \varepsilon}}{2\sqrt{Dt}} \right) \right], \quad (9)$$

где: $Z_1 = xV \frac{1 - \sqrt{1 + \varepsilon}}{2D}$; $Z_2 = xV \frac{1 + \sqrt{1 + \varepsilon}}{2D}$; $\varepsilon = \frac{4DK}{V^2}$; C_H , C_ϕ – начальная концентрация в разливе и естественная (фоновая) концентрация, мг/л, соответственно.

При больших значениях времени t или при $xV/D \gg 5$ первым слагаемым можно пренебречь в силу его малости. Тогда, учитывая, что $\varepsilon \ll 1$ уравнение (6) переписывается как

$$C(x,t) = \frac{C(x,t) - C_\phi}{C_H - C_\phi} = \frac{1}{2} e^{-\frac{xV}{D}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - Vt}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (10)$$

Если допустить отсутствие дисперсии стоков ($D=Dx \approx 0$), то математическая задача миграции будет иметь вид:

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} + KC = 0; C(x,0)=0; C(0,t)=C_H. \quad (11)$$

Задача (11) решена [1] методом интегрального преобразования Лапласа и получено выражение

$$C(x,t) = C_H e^{-\frac{Kx}{V}} f(\lambda). \quad (12)$$

В уравнении (12) $f(\lambda)$ - единичная функция, равная

$$f(\lambda) = \begin{cases} 0 & \text{при } \lambda = (t - t_0) < 0 \\ 1 & \text{при } \lambda = (t - t_0) > 0 \end{cases},$$

где: $t_0 = xV$, $\lambda = t - t_0 = t - xV$.

В случае аварийной ситуации – разлива значительного количества загрязняющего вещества – фоновой концентрацией можно пренебречь ($C_\phi=0$), концентрация трансформирующегося загрязняющего вещества на фронте вытеснения уменьшается с удалением от места сброса (при $x \rightarrow \infty$) $C(x,t) \rightarrow 0$.

Одновременно с проникновением загрязняющего вещества в почву будет проходить его испарение с поверхности разлива участка, площадь которого можно оценить длиной и шириной.

Задача построения математической модели распространения вредных выбросов в атмосферу и ее усовершенствования до настоящего времени является актуальной [7-12].

Количество той или иной примеси, содержащейся в единице объема воздуха, называется объемной концентрацией (или просто концентрацией) примеси – C , а скорость поступления примеси в воздух от того или иного источника, т.е. количество примеси, выбрасываемой в воздух в единицу времени, можно называть интенсивностью источника – F .

В основу математической модели [7] положена Гауссова модель.

Основные характеристики и особенности гауссовых моделей распространения вредных примесей в атмосфере приведены в работе [7]. Основным уравнением, характеризующим распространение газов в атмосфере, является локальный закон сохранения вещества, который представлен в виде:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{J}) + \lambda n = 0, \quad (13)$$

где: n - концентрация газового загрязнителя;

λ - коэффициент, описывающий уменьшение концентрации газового загрязнителя за счёт абсорбции;

\bar{J} - плотность потока диффундирующего вещества, представляющего собой сумму потоков молекулярной и турбулентной диффузии.

При этом авторами делается предположение, что перенос газового загрязнителя в нижний слой незначителен в отличие от переноса в верхние слои атмосферы, что далеко не всегда оправдано. В итоге авторы приходят к дифференциальному уравнению конвективной диффузии вида

$$\frac{\partial n}{\partial t} + v_x \frac{\partial n}{\partial x} + v_y \frac{\partial n}{\partial y} + v_z \frac{\partial n}{\partial z} = k_x \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + k_y \frac{\partial^2 n}{\partial y^2} + k_z \frac{\partial^2 n}{\partial z^2} - \lambda n \quad (14)$$

Скорость изменения концентрации примеси в произвольной точке пространства – $\partial C/\partial t$ определяется градиентом концентрации, скоростью испарения загрязняющего вещества, температурой окружающей среды (коэффициентами конвективной диффузии), расположением в пространстве источников примеси, составляющими скорости ветра – u , v , w вдоль осей x , y , z , коэффициентами атмосферной турбулентности – k и др. [6].

В общем виде эту зависимость [6] определили дифференциальным уравнением баланса примеси или уравнением ее переноса:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_a}{\partial t} = & D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} - v \frac{\partial C}{\partial y} - w \frac{\partial C}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial C}{\partial x} + w_e C \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial C}{\partial z} \right) + F + R - P - W = f(u, v, w, k, w_e, F, R, P, W) \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь W^e – собственная вертикальная скорость примеси, R и P – скорость образования и уничтожения примеси в результате химических реакций, W – скорость выпадения примеси на подстилающую поверхность.

Уравнение (15) свидетельствует о том, что перенос загрязняющего вещества в движущейся среде обусловлен двумя различными физическими факторами: во-первых, при наличии разности концентраций идет процесс молекулярной диффузии: во-вторых, частицы примеси увлекаются движущейся средой и переносятся вместе с ней.

Для определения скорости изменения концентрации примеси в любой точке заданного пространства $\partial C/\partial t$ на основе уравнения (10) должны быть заданы параметры u , v , w (составляющие скорости ветра, определяемые путем измерений), а также величины W^e , F , R , P , W . Кроме этого должны быть заданы условия на границах области расчета. Если область расчета ограничена сверху поверхностью $x=H$, а снизу земной поверхностью $z=0$, то условия на этих границах задаются в виде:

$$\text{при } x=H, C_e=0 \text{ или } k \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad (16)$$

$$\text{при } x=0, k \frac{\partial C}{\partial x} + W^e, C = \beta C. \quad (17)$$

При рассмотрении примеси в слое толщиной H порядка 2...5 км условия (13) означают исчезновение примеси или ее вертикального потока на этой границе. Условие (14) на земной поверхности имеет смысл равенства вертикального турбулентного потока и потока примеси при ее гравитационном оседании на поверхность со скоростью W^e количеству примеси, поглощаемой поверхностью, βC , где β - коэффициент аккомодации, зависящий от физических свойств подстилающей поверхности, наличия на ней растительности или застроек.

Таким образом, математическую модель распространения загрязняющего вещества в почве и в воздушной среде при возникновении аварийной ситуации – разлив на открытую поверхность земли – можно представить нелинейными дифференциальными уравнениями (4) и (15), которые описывают конвективные диффузионные потоки. При этом целесообразно учитывать как концентрационные изменения, так и изменения физического состояния (параметров) загрязняющего вещества, относя их к процессам аккумуляции (трансформации).

Исследование с использованием математической модели процесса распространения загрязняющего вещества в почве и в воздушной среде при возникновении аварийной ситуации возможно только при использовании современных средств вычислительной техники. С учетом сложности самой модели и необходимости получить результаты моделирования аварийной ситуации для разработки плана ее обезвреживания в кратчайшие сроки очень перспективным представляется для этого применение распределенных гетерогенных вычислительных систем.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шульгин Д.Ф., Иванов В.Н., Клыков В.Е. Гидрохимические параметры математических моделей переноса питательных веществ в торфяных и дерново-подзолистых почвах // Почвоведение. – 1987. №3. С. 27-34.
2. Расчет распространения загрязняющих веществ в водотоке с учетом их разложения и разбавления / Иванов В.Н., Клыков В.Е., Косов В.И., Шульгин

- Д.Ф. // Инженерная гидрология и охрана водных ресурсов, Тверь: ТГТУ, 1994. С. 119-124.
3. Ионообменные процессы и электрокинетические явления в набухающих природных и синтетических ионитах / Н.И. Гамаюнов, В.И. Косов, Б.И. Масленников // Тверь, 1999, 156 с.
 4. Surmava A. The Numerical Modeling of Spreading of Spilled Oil and Oil Products in Some Soils of Georgia // J. Georgian Geophys. Soc., vol. 6b, 2001, pp. 41-46.
 5. Surmava A.A., Kukhalashvili V.G., Kacharava G.G. Numerical 3D Model of Soil Pollution by Oil // J. Georgian Geophys. Soc., v.9b, 2005, pp. 18-22.
 6. Н.А. Бегалишвили, Н.Н. Наскидашвили, Л.У. Шавлиашвили, Д.М. Шавладзе ли, Д.М. Шавладзе. Агроинженерия. Математическое моделирование просачивания загрязняющего вещества в почву при аварийных разливах нефти / Известия аграрной науки, Том 8, Ном. 4, 2010.
 7. Анфилатов А.А. Расчет выбросов вредных газообразных веществ с отработавшими газами дизеля при работе на метаноле // Молодой ученый. - 2015. - №12. - С. 139-141.
 8. Равшанов Н., Шарипов Д.К., Хамдамова Р. Модель и численный алгоритм для исследования процесса распространения вредных веществ в атмосфере [Текст] // Актуальные вопросы технических наук: материалы междунар. науч. конф. (г. Пермь, июль 2011 г.). - Пермь: Меркурий, 2011. - С. 20-26.
 9. Белихов А.Б., Леготин Д.Л., Сухов А.К. Современные компьютерные модели распространения загрязняющих веществ в атмосфере. Вестник КГУ им. Некрасова, №1 – 2013.
 10. Чернявский С.А. Математическая модель процесса распространения в атмосфере газовых загрязнителей при различных погодных условиях «Технические науки от теории к практике»: материалы XX международной заочной научно-практической конференции (17 апреля 2013 г.).
 11. Бызова Н.Л., Гаргер Е.Г., Иванов В.Н., Экспериментальные исследования атмосферной диффузии и расчеты рассеяния примесей. – Л.: Гидрометеиздат, 1991. – 273 с.
 12. Семенчин Е.А., Кузякина М.В. Стохастические методы решения обратных задач в математической модели атмосферной диффузии – М.: Физматлит, 2012. – 176 с.

Matveev Yuriy Nikolaevich

Tver state technical university, Russia, Tver
E-mail: matveev4700@mail.ru

Maslennikov Boris Ivanovich

Tver state technical university, Russia, Tver
E-mail: bimnew@yandex.ru

Karelskaya Katerina Aleksandrovna

Tver state technical university, Russia, Tver
E-mail: kak69@yandex.ru

Stukalova Nataliya Aleksandrovna

Tver state technical university, Russia, Tver
E-mail: nast77@mail.ru

Mathematical model operation of processes of distribution of a contaminant in soils and the atmosphere at its emergency flood

Abstract. At problem solving of management on elimination of emergency, the bound to local pollutions and to the soil of pollutants, projection of distribution of harmful substances in the soil and in the air environment is important.

The modern works are devoted to a research of various technogenic sources on the nature of emissions and on their volumes. Tasks are formulated as systems of nonlinear differential equations. It is possible to solve them analytically – by introduction of the simplifying assumptions, at the same time the considerable inaccuracies of calculation of distribution of a contaminant are possible. Other candidate solution is the mechanical method. But in this case limitation of a machine resource can be the main shortcoming.

Authors made analytical researches of model operation of process of distribution of a contaminant in the atmosphere and soils in emergency. As a pollutant rather easily volatilized liquid is considered. Differential equations of transfer for a problem of the emergency flood of a contaminant on the restricted area of the soil with the given wind field are given in work.

The research with use of mathematical model of process of distribution of a contaminant in the soil and in the air environment at emergence is possible using the modern computer aids. As the model is the composite, and results of model operation have to be submitted within the shortest possible time, for the solution of such task using of the distributed heterogeneous computing systems is perspective.

Keywords: math modeling; emergencies; contaminants; harmful emissions; substances spread; projection; a system of nonlinear differential equations; Gaussian model; computing resources; distributed systems