



«Современные методы математического и компьютерного моделирования экологических проблем крупных и промышленных городов»

Темирбеков Нурлан Муханович

*вице-президент ИИА РК, д.ф.-м.н., профессор,
академик ИИА РК, член-корреспондент НАН РК*

Постановка натуральных экспериментов для выявления последствий антропогенной деятельности требует значительного капиталовложения и затруднена большими пространственными масштабами процесса. Иногда их реализация может привести к необратимым последствиям для окружающей среды. Кроме того, эксперименты не позволяют в полной мере учесть такие существенные факторы, влияющие на процесс распространения, как гидрометеорологические условия, орографические неоднородности местности, трансформации веществ за счет химических и фотохимических превращений, взаимодействия с подстилающей поверхностью. Для приближенного решения уравнений пограничного слоя атмосферы необходимо разработать эффективный численный алгоритм. Становится ясно, что организация всего вычислительного цикла требует большого искусства. Поэтому исследование уравнений пограничного слоя атмосферы является актуальной темой.

Например, при взаимодействии диоксида азота NO_2 с радикалом OH образуется азотная кислота.



Таким образом, большая часть азотной кислоты выводится из атмосферы с атмосферными осадками в виде растворов HNO_3 и ее солей нитратов. Химические реакции в которые вступают выбранные пятнадцать веществ и константы скоростей процессов мокрого и сухого осаждения и превращения соответствующих реакций приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Стехиометрические формулы и константы скоростей реакций

Номер реакции <i>m</i>	Реакции	Константа скорости реакций k_m	Номер реакции <i>m</i>	Реакции	Константа скорости реакций k_m
28	$\text{NO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{HNO}_3$	$2,4 \cdot 10^{-11}$	140	$\text{SO}_2^* + \text{O}_3 \rightarrow \text{SO}_3 + \text{O}_2$	$1,7 \cdot 10^{-12}$
29	$\text{NO}_2 + \text{O}_3 \rightarrow \text{NO}_3 + \text{O}_2$	$2,9 \cdot 10^{-17}$	141	$\text{SO}_2^* + \text{CO} \rightarrow \text{SO} + \text{CO}_2$	$4,3 \cdot 10^{-15}$
32	$\text{NO}_3 + \text{NO} \rightarrow 2\text{NO}_2$	$1,9 \cdot 10^{-11}$	143	$\text{SO}_2^* + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_5\text{SO}_2\text{H}$	$2,8 \cdot 10^{-11}$
33	$\text{NO}_3 + h\nu \rightarrow \text{NO}_2 + \text{O}$	$2,1 \cdot 10^{-1a}$	144	$\text{SO} + \text{O}_3 \rightarrow \text{SO}_2 + \text{O}_2$	$6,7 \cdot 10^{-14}$
34	$\text{NO}_3 + h\nu \rightarrow \text{NO} + \text{O}_2$	$2,2 \cdot 10^{-2a}$	145	$\text{SO} + \text{NO}_2 \rightarrow \text{SO}_2 + \text{NO}$	$1,4 \cdot 10^{-11}$
36	$\text{NO}_3 + \text{NO}_2 \rightarrow \text{NO}_2 + \text{NO} + \text{O}_2$	$7,5 \cdot 10^{-15}$	146	$\text{SO} + \text{O}_2 \rightarrow \text{SO}_2 + \text{O}$	$8,4 \cdot 10^{-17}$
37	$2\text{NO}_3 \rightarrow 2\text{NO}_2 + \text{O}_2$	$2,6 \cdot 10^{-15}$	147	$\text{SO}_2 + \text{SO}_2^* \rightarrow \text{SO}_3 + \text{O}_2$	$6,3 \cdot 10^{-14}$
43	$\text{HNO}_3 + h\nu \rightarrow \text{OH} + \text{NO}_2$	$7,8 \cdot 10^{-7a}$	148	$\text{SO}_2 + \text{O}_3 \rightarrow \text{SO}_3 + \text{O}_2$	$1 \cdot 10^{-22}$
44	$\text{HNO}_3 + \text{OH} \rightarrow \text{NO}_3 + \text{H}_2\text{O}$	$8,5 \cdot 10^{-14}$	149	$\text{SO}_2 + \text{OH} \rightarrow \text{HSO}_3$	$1,5 \cdot 10^{-12}$
62	$\text{CH}_2\text{O} + \text{NO}_3 \rightarrow \text{HNO}_3 + \text{HCO}$	$6 \cdot 10^{-16}$	150	$\text{SO}_2 + \text{HO}_2 \rightarrow \text{SO}_3 + \text{OH}$	$1 \cdot 10^{-18}$
89	$\text{CH}_3\text{CHO} + \text{NO}_3 \rightarrow \text{HNO}_3 + \text{CH}_3\text{CO}$	$2,7 \cdot 10^{-15}$	151	$\text{SO}_2 + \text{NO}_3 \rightarrow \text{SO}_3 + \text{NO}_2$	$1 \cdot 10^{-20}$
91	$\text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{NO} \rightarrow \text{CH}_3\text{CO}_2 + \text{NO}_2$	$1,4 \cdot 10^{-12}$	152	$\text{SO}_2 + \text{CH}_3\text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{O} + \text{SO}_3$	$1 \cdot 10^{-17}$
93	$\text{CH}_3\text{CO}_3 + \text{SO}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{CO}_2 + \text{SO}_3$	$2 \cdot 10^{-17}$	153	$\text{SO}_3 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}_2\text{SO}_4$	$9 \cdot 10^{-13}$
115	$\text{CH}_2\text{O}_2 + \text{SO}_2 \rightarrow \text{SO}_3 + \text{CH}_2\text{O}$	$1,75 \cdot 10^{-14}$	154	$\text{HSO}_3 + \text{O}_2 \rightarrow \text{HO}_2 + \text{SO}_3$	$4 \cdot 10^{-13}$
137	$\text{SO}_2 + h\nu \rightarrow \text{SO}_2^*$	$1,4 \cdot 10^{-5a}$	155	$\text{HO}_2 + \text{NO}_3 \rightarrow \text{OH} + \text{NO}_2 + \text{O}_2$	$4,3 \cdot 10^{-12}$
138	$\text{SO}_2^* + \text{M} \rightarrow \text{SO}_2 + \text{M}$	$1,5 \cdot 10^{-13}$	156	$\text{SO}_2 + \text{CH}_3\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OSO}_2$	$5 \cdot 10^{-13}$
139	$\text{SO}_2^* + \text{O}_2 \rightarrow \text{SO}_3 + \text{O}$	$2,6 \cdot 10^{-15}$			

Примечание: здесь а – это константа скорости реакции первого порядка (с^{-1}); остальные – константы скоростей реакций второго порядка ($\text{см}^3\text{с}^{-1}$). Константы скоростей приведены при стандартных условиях.

1 МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ АТМОСФЕРЫ

1.1 ХИМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФОТОХИМИЧЕСКИХ ТРАНСФОРМАЦИЙ

Для моделирования фотохимических процессов выбраны наиболее распространенные пятнадцать видов вредных веществ как CH_2O , CO , CO_2 , SO_2 , SO_3 , HSO_3 , NO , NO_2 , NO_3 , HNO_3 , MgO , CaO , H_2SO_4 , MgSO_4 , CaSO_4 и химические реакции между ними.



Рисунок 1- Схема превращения загрязняющих веществ

Химические превращения приведенные в схеме (Рисунок 1) описываются системой из пятнадцати дифференциальных уравнений. Данные уравнения имеют следующий вид.

$$\frac{d\varphi_{CH_2O}}{dt} = -k_{60}\varphi_{CH_2O} - k_{62}\varphi_{CH_2O} + f_{CH_2O} \quad (1.1.1)$$

$$\frac{d\varphi_{CO}}{dt} = k_{60}\varphi_{CH_2O} - k_{65}\varphi_{CO} - k_{141}\varphi_{CO} + f_{CO} \quad (1.1.2)$$

$$\frac{d\varphi_{CO_2}}{dt} = k_{65}\varphi_{CO} + k_{141}\varphi_{CO} + f_{CO_2} \quad (1.1.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi_{SO_2}}{dt} = & -k_6\varphi_{SO_2} - k_{93}\varphi_{SO_2} - k_{115}\varphi_{SO_2} - k_{116}\varphi_{SO_2} - k_{139}k_{137}\varphi_{SO_2} \\ & - k_{140}k_{137}\varphi_{SO_2} - k_{147}\varphi_{SO_2} - k_{148}\varphi_{SO_2} - k_{149}\varphi_{SO_2} - \\ & - k_{150}\varphi_{SO_2} - k_{151}\varphi_{SO_2} - k_{152}\varphi_{SO_2} + f_{SO_2} \end{aligned} \quad (1.1.4)$$

1.2 НЕГИДРОСТАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ АТМОСФЕРЫ

Для изучения влияния антропогенных источников тепла, вредных веществ и неоднородности подстилающей поверхности в атмосферу промышленного города в трехмерной области $\Omega = \{(x, y, z) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1, 0 \leq z \leq 1\}$ рассматривается модель пограничного слоя атмосферы следующего вида

Уравнения движения:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial u^2}{\partial x} + \frac{\partial uv}{\partial y} + \frac{\partial u\omega}{\partial z} = -\frac{\partial \pi}{\partial x} + l\nu + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \Delta u \quad (1.2.1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial uv}{\partial x} + \frac{\partial v^2}{\partial y} + \frac{\partial v\omega}{\partial z} = -\frac{\partial \pi}{\partial y} - lu + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial v}{\partial z} \right) + \Delta v \quad (1.2.2)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial u\omega}{\partial x} + \frac{\partial v\omega}{\partial y} + \frac{\partial \omega^2}{\partial z} = -\frac{\partial \pi}{\partial z} + \lambda\theta + \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu \frac{\partial \omega}{\partial z} \right) + \Delta \omega \quad (1.2.3)$$

Уравнения неразрывности:

$$\operatorname{div} \vec{U} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial \omega}{\partial z} = 0 \quad (1.2.4)$$

уравнения притока тепла:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial u \theta}{\partial x} + \frac{\partial v \theta}{\partial y} + \frac{\partial \omega \theta}{\partial z} + u \left(S \frac{\partial \delta}{\partial x} + \theta_x \right) + v \left(S \frac{\partial \delta}{\partial y} + \theta_y \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) + \Delta \theta \quad (1.2.5)$$

для моделирования переноса и трансформации примесей используем уравнения следующего вида:

$$\frac{\partial \varphi_q}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi_q}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi_q}{\partial y} + \frac{\partial \omega \varphi_q}{\partial z} = \Delta \varphi_q + \frac{\partial}{\partial z} \left(v \frac{\partial \varphi_q}{\partial z} \right) + \alpha_q \varphi_q + \beta_q + f_q \quad (1.2.6)$$

$$\vec{V} = \vec{V}^0(x, y, z), \quad \theta = \theta^0(x, y, z), \quad \varphi_q = \varphi_q^0(x, y, z) \quad \text{при } t = 0$$

$$u = u_1(y, z, t), \quad v = v_1(y, z, t), \quad \omega = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0, \quad \varphi_q = \varphi_q^0, \quad \text{при } x = 0 \quad 0 \leq y \leq Y$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0, \quad v = 0, \quad \omega = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \varphi_q}{\partial x} = 0 \quad \text{при } x = X \quad 0 \leq y \leq Y \quad (1.2.7)$$

$$u = u_2(x, z, t), \quad v = v_2(x, z, t), \quad \omega = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = 0, \quad \varphi_q = \varphi_q^0 \quad \text{при } y = 0 \quad 0 \leq x \leq X$$

$$u = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad \omega = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \varphi_q}{\partial y} = 0 \quad \text{при } y = Y \quad 0 \leq x \leq X$$

$$u = 0, \quad v = 0, \quad \omega = 0, \quad \theta = 0, \quad \pi = 0, \quad \varphi_q = 0 \quad \text{при } z = H$$

$$\omega = 0, \quad h \frac{\partial u}{\partial z} = a_u u, \quad h \frac{\partial v}{\partial z} = a_v v, \quad h \frac{\partial \theta}{\partial z} = a_\theta (\theta - \theta_0), \quad \text{при } z = h$$

3 ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ В АТМОСФЕРЕ ПРОМЫШЛЕННОГО ГОРОДА С УЧЕТОМ ФОТОХИМИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

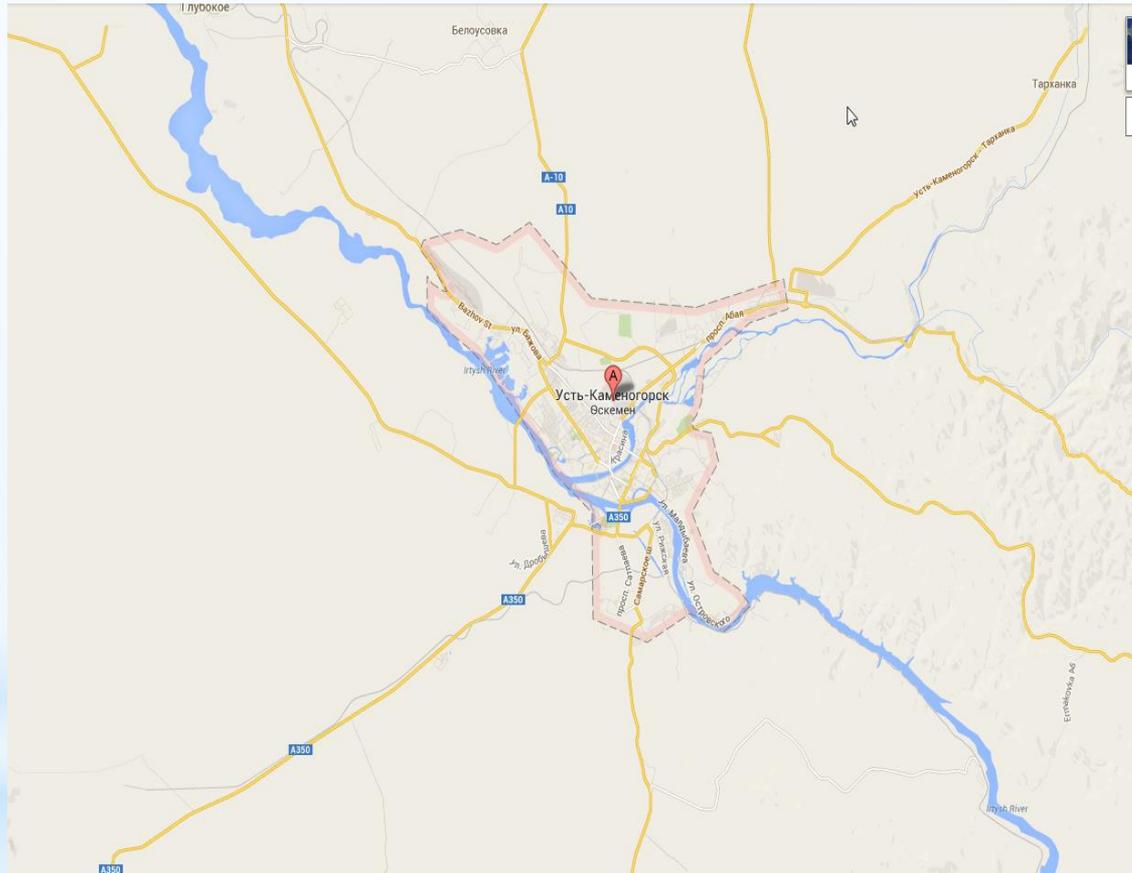


Рисунок 7- Карта города с масштабом 35×35 км.

Количество пунктов	Место расположения
1	Южнее Северной промзоны, ул. Гастелло, 14, ГУ школа, проходная
2	П. Защита, ул. Делегатская, 36, АО «Кедентранссервис», проходная
3	Ул. Казахстан, 154 Б, АО «Трамвайный парк», диспетчерская
4	Пр. Ауэзова, 5, Станция Юных техников, балкон
5	П. Мирный, ул. Пограничная, 59, ГКП «Оскемен Водоканал», обмоточный цех
6	Переносной совмещен с постом № 7 Гидромета - ул. Первооктябрьская, 126 (ст. Защита)
7	Ул. Путевая, 2, ТОО «Оскемен терминал», проходная
8	П. Новая Согра, ул. Менделеева, 13А, ТМК ГКП «Новая Согра», здание мастерской
9	Пр. Абая, 102, АО «УМЗ», корпус 500, бассейн

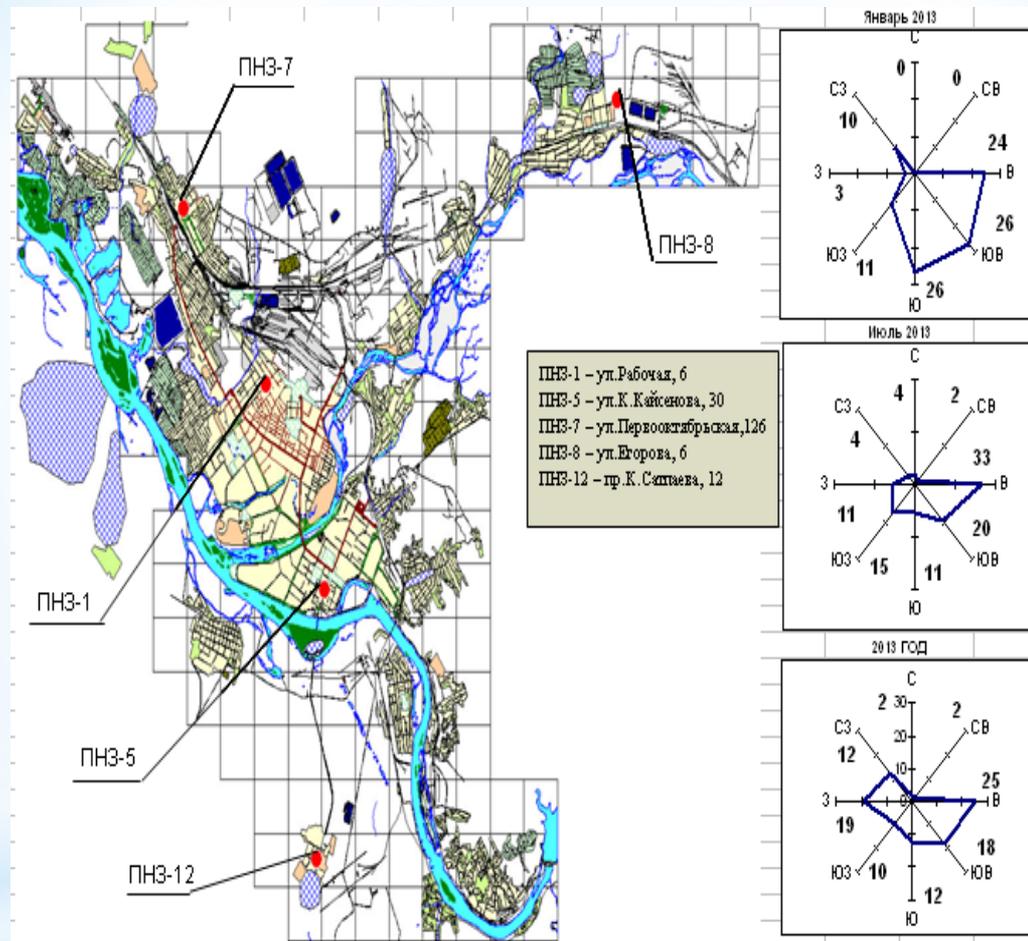


Рисунок 8- Роза ветров г.Усть-Каменогорск

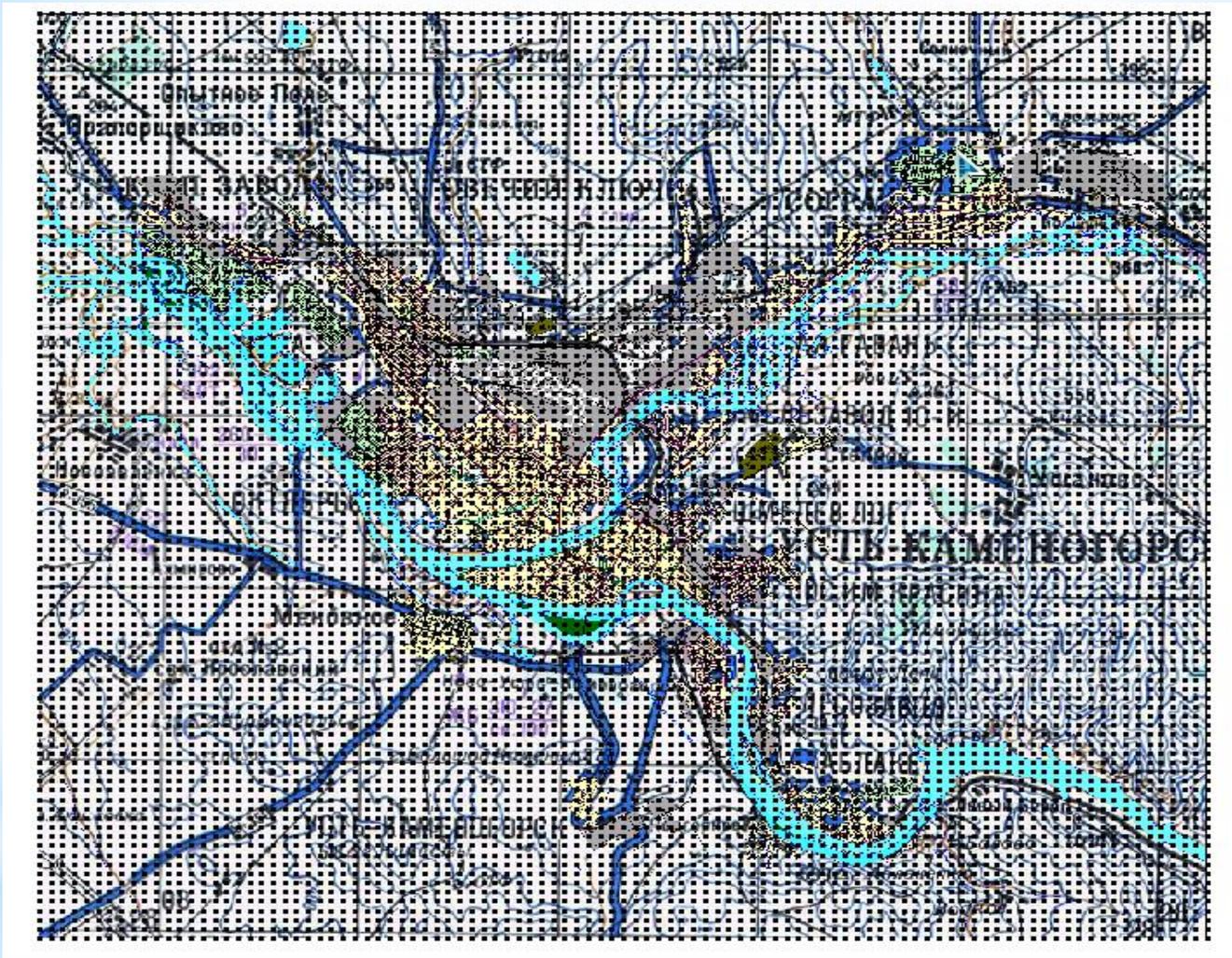


Рисунок 9 - Наложенная сетка на карту города Усть-Каменогорск

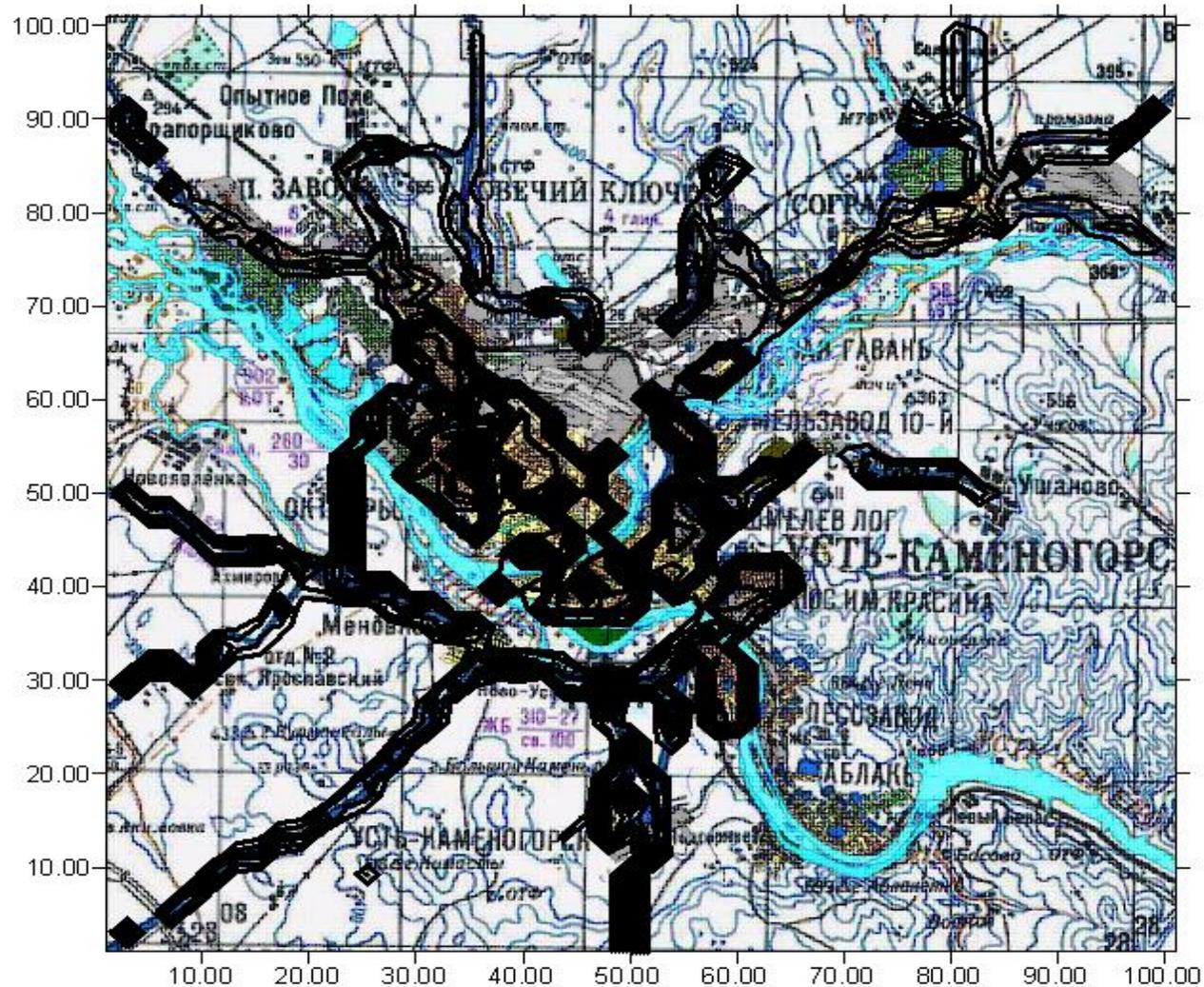


Рисунок 10 - Визуализация полученных данных от РАИСПЭМ и РГП «Казгидромет»

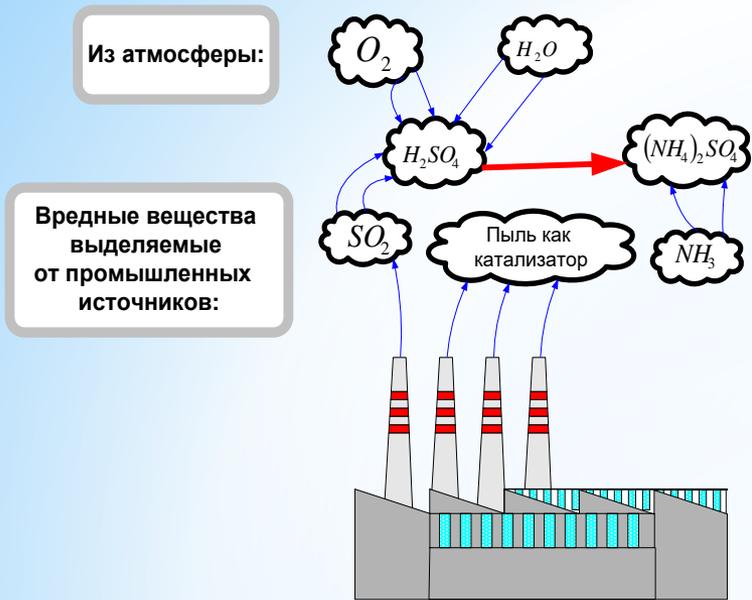


Рисунок 11- Процесс окисления

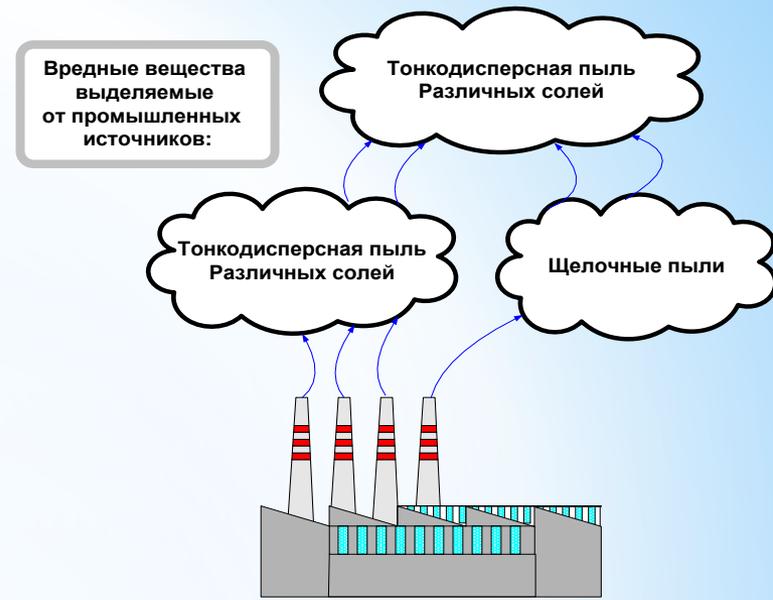


Рисунок 12- Превращение газа в твердые вещества

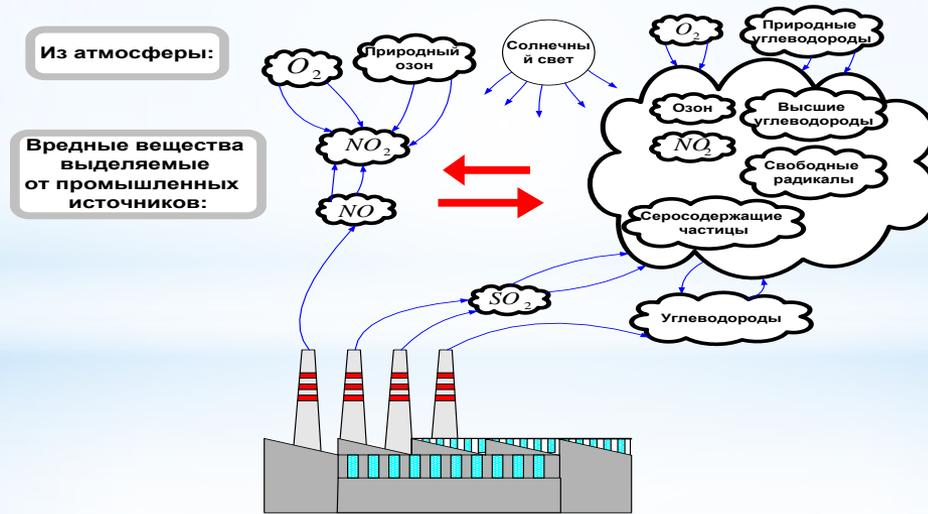
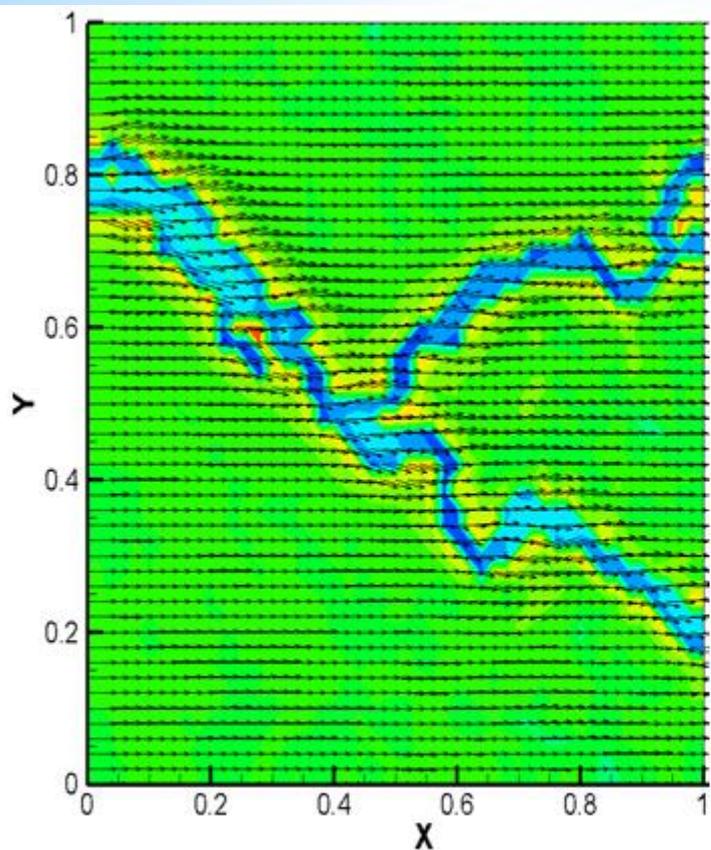
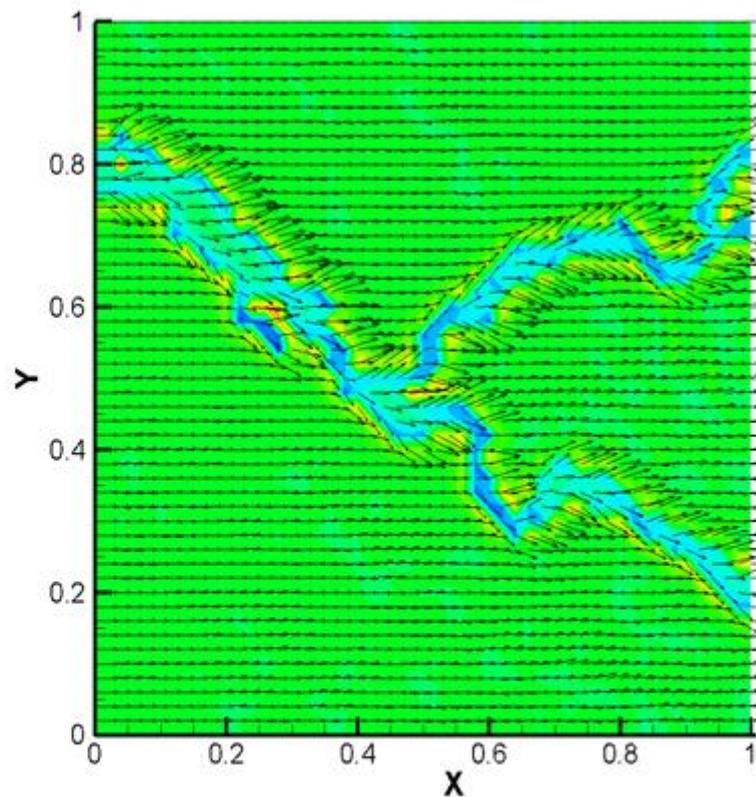


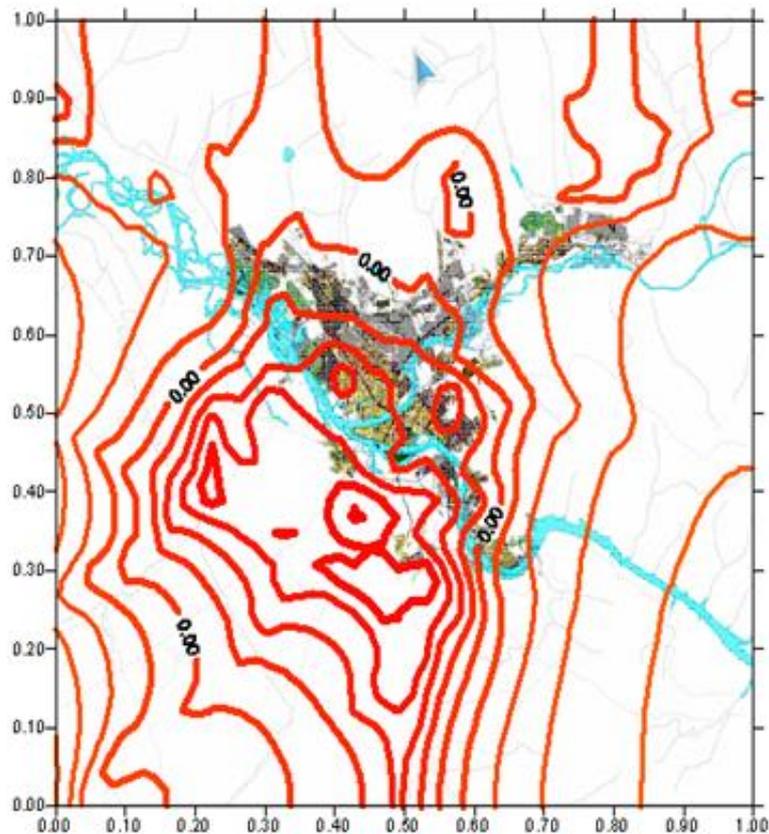
Рисунок 13- Цепные фотохимические реакции



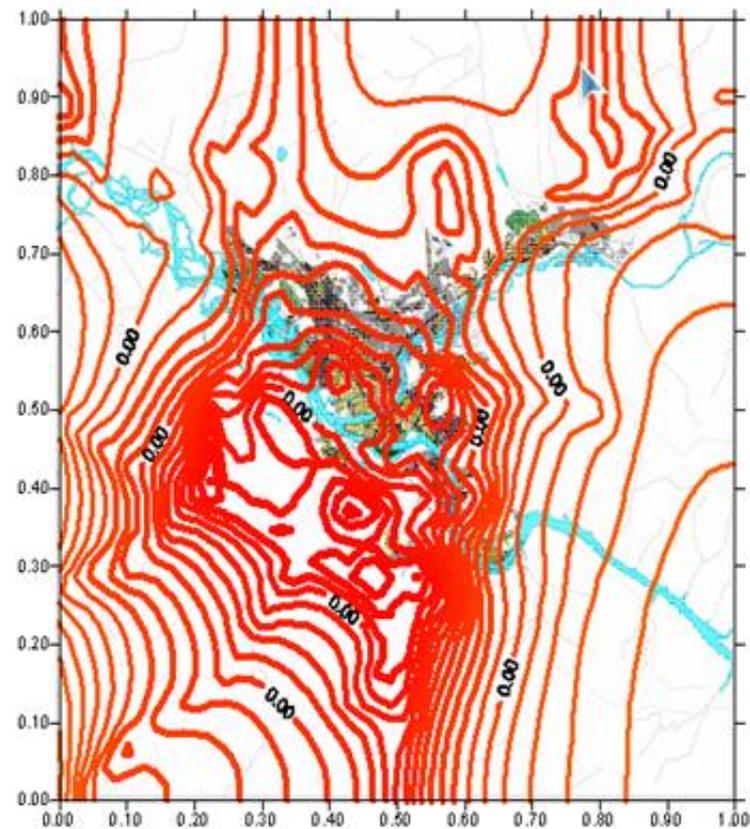
Отклонение направления ветра над водными поверхностями при скорости ветра 1 м/с



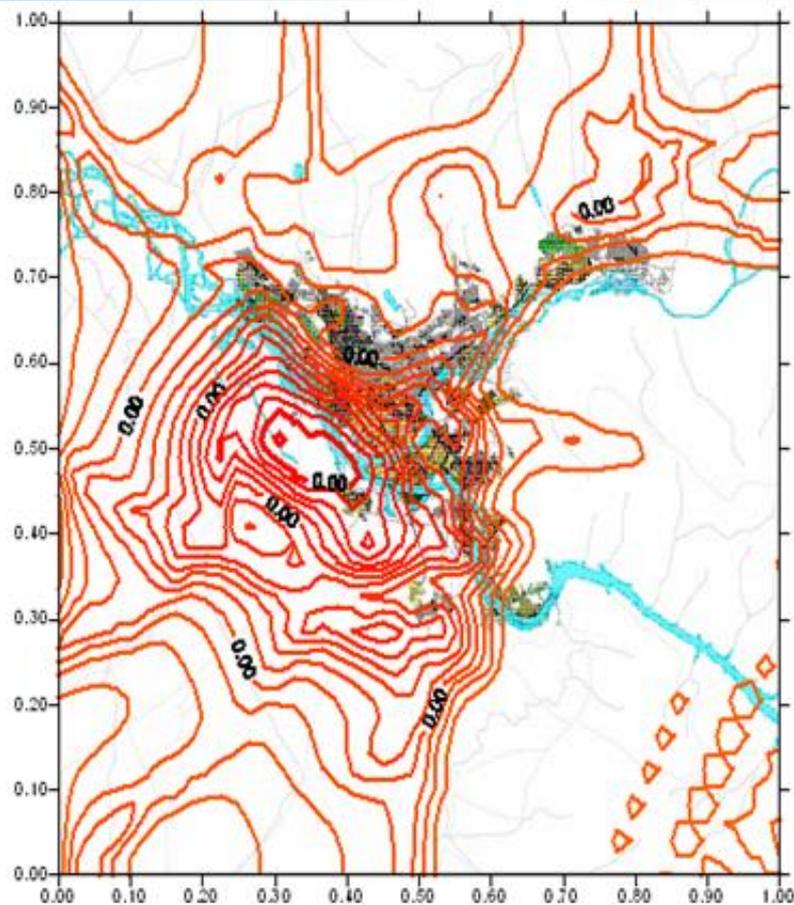
Отклонение направления ветра над водными поверхностями при скорости ветра 2 м/с



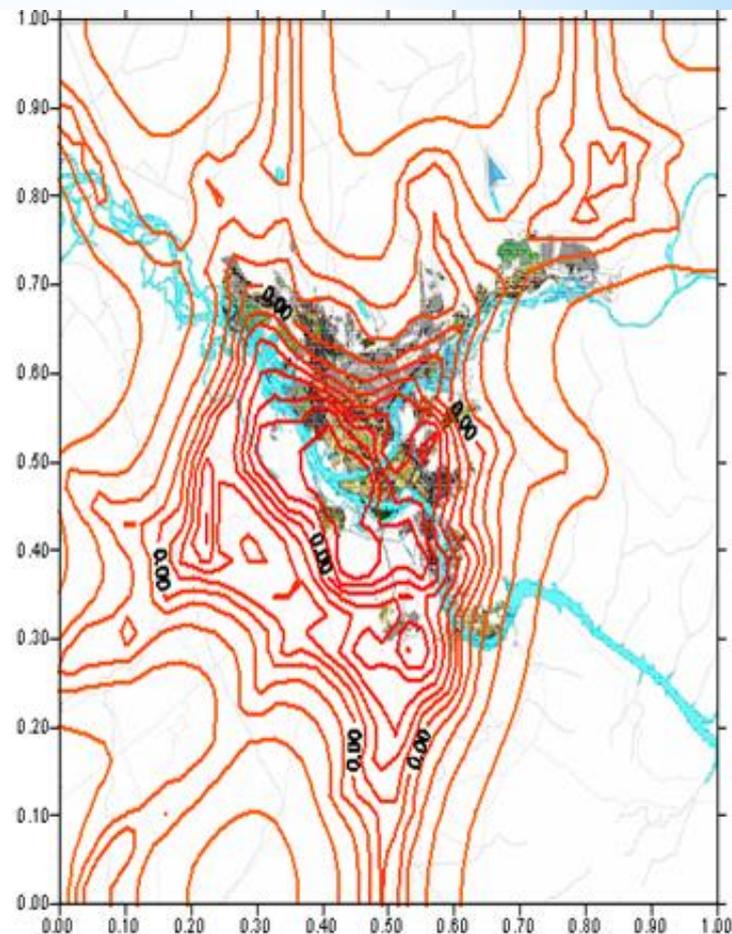
Распространение CO (монооксид углерода) при неблагоприятных метеоусловиях (при отсутствии ветра)



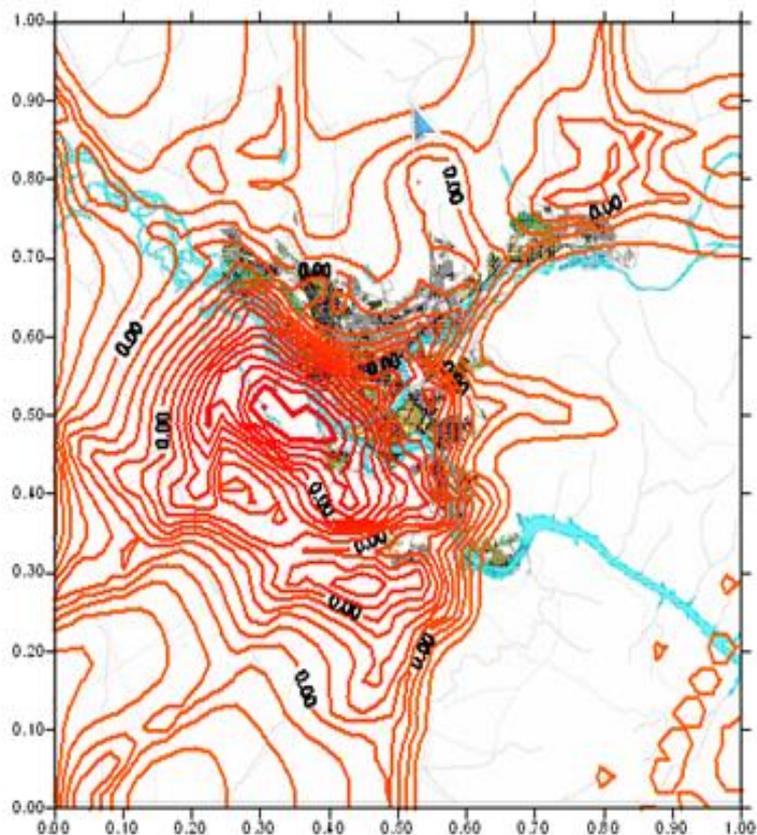
Распространение CO₂(диоксид углерода) при благоприятных метеоусловиях (при отсутствии ветра)



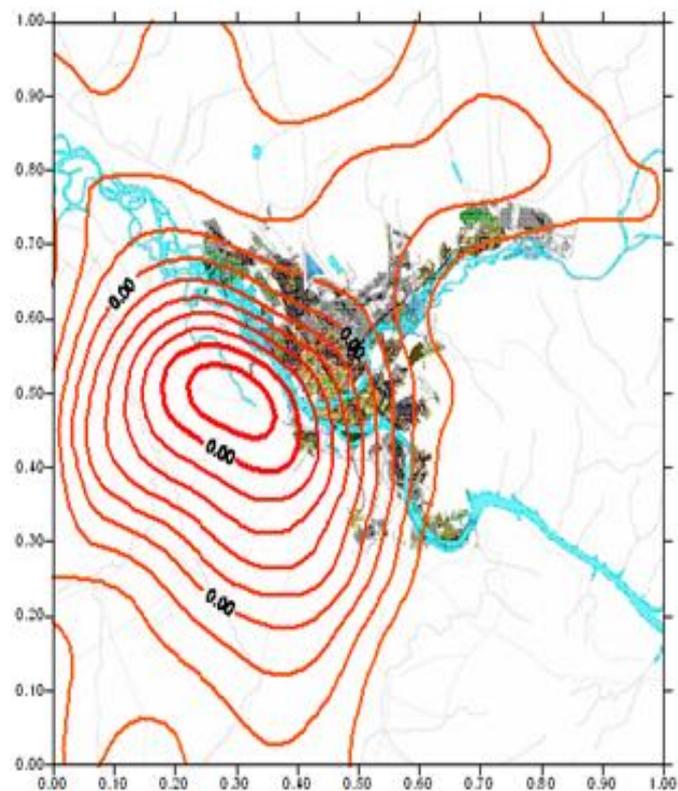
Распространение SO_2 (оксид серы) при юго-восточном направлении ветра со скоростью 7 м/с



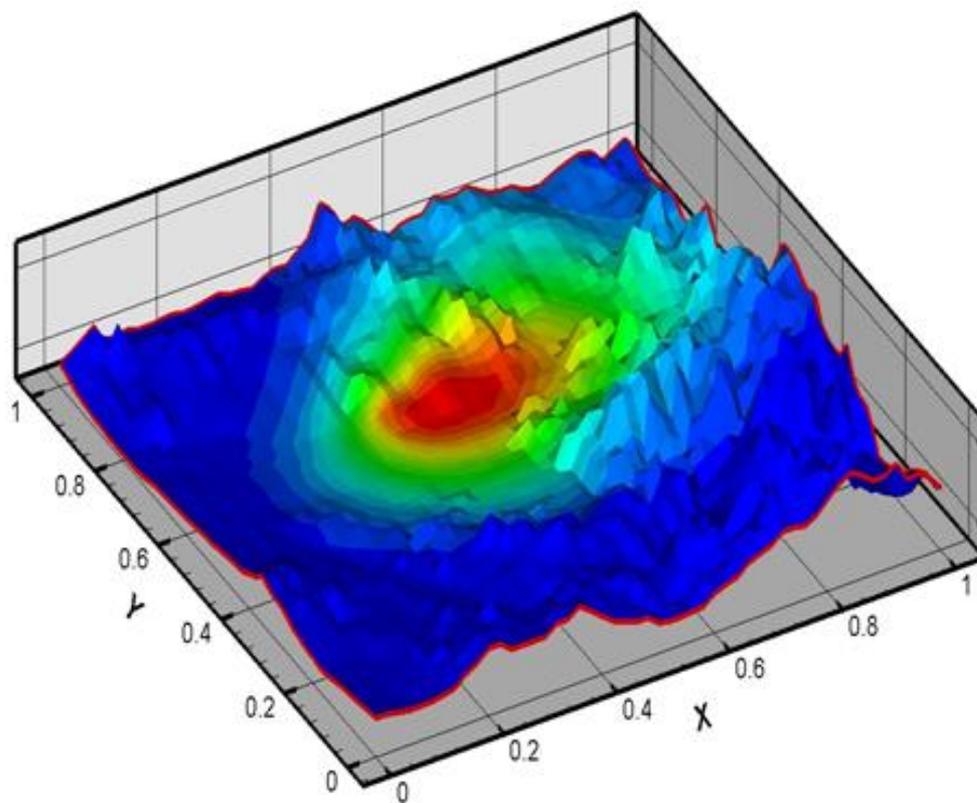
Распространение NO (оксид азота) при юго-восточном направлении ветра со скоростью 7 м/с



Распространение CaO (оксид кальция) при юго-восточном направлении ветра со скоростью 7 м/с



Распространение CaSO_4 (сульфат кальция) при юго-восточном направлении ветра со скоростью 2 м/с



Распространение H_2SO_4 (сернистая кислота) при западном направлении ветра 4 м/с в трехмерном виде

Спасибо за внимание!