УДК 536.516:621.1

ДИНАМИКА ДИФФУЗИИ ВРЕДНЫХ ВЫБРОСОВ В АТМОСФЕРЕ

Б.Х. Драганов, доктор технических наук

Национальный университет биоресурсов и природопользования Украины

Изложены закономерности молекулярной и кинетической диффузии многокомпонентных вредных выбросов. Приведен метод решения сформулированной математической модели.

Диффузионный поток, концентрация, нелинейная, нестационарная диффузия.

Одна из актуальных проблем волнующая человечество и требующая свое решение – это загрязнение окружающей среды. Существенный отрицательный экологический эффект вызван выбросом в атмосферу аэрозолей, содержащих твердые частицы. Для решения этой проблемы необходимо, в числе других способов, изучить закономерности распространения этих выбросов. Атмосфера загрязненная антропогенными выбросами представляет собой гетерогенную многофазную среду.

Широкий класс технологических процессов, при которых имеют место химические реакции и теплофизические превращения, сопровождаются большим количеством выбросов вредных для окружающей среды. Значительная часть вредных ингредиентов возникают и попадают в атмосферу. Под действием они могут распространятся в пространстве, а затем выпадать на землю, что может привести значительный вред окружающему растительному и животному миру.

Эти явления подчиняются закономерностям гидродинамики многокомпонентных сред. Кроме того, в многокомпонентной среде имеют место молекулярная и кинетическая диффузия.

Цель исследований – сформулировать задачу молекулярной и кинетической диффузии многокомпонентных и многофазных техногенных выбросов в окружающую среду и указать метод решения.

Материалы и методы исследований. Сформулированы математические модели для молекулярной и кинетической диффузии. Анализируется динамика диффузии при действии потока ветра.

Результаты исследования. Будем считать, что нарушение равновесия в среде связано с изменением концентрации от точки к точке и с наличием в ней макроскопического конвективного движения. Предположим, что температура смеси является постоянной, а градиент давления достаточно малым.

Таким образом, перенесение вещества в подвижной среде будет обусловлено лишь двумя разными механизмами. Во-первых, взвешенные газоаэрозольные частицы увлекаются средой и переносятся вместе с ним, во-

вторых, при наличии разницы концентрации в среде возникает молекулярная

и турбулентная диффузия. Совокупность обоих процессов называют конвективной диффузией вещества в воздушной или жидкой среде. Запишем дифференциальное уравнение, которое описывает диффузное перенесение в подвижной несжимаемой среде [1]. Предположим, что процесс происходит в стационарном и ламинарном режиме.

В данном пространстве можно провести некоторые мнимые поверхности, в каждой точке которых в момент времени 1 концентрация постоянна. Такие поверхности называют изоплетами. Основная гипотеза математической теории диффузии заключается в том, что диффузионный поток вещества через единицу площади изоплеты в единицу времени изнутри в наружу, равняется:

$$\vec{J}_d = -D\frac{\partial C}{\partial n} = -DgradC = -D\frac{\partial C}{\partial x_k}, \qquad (1)$$

где D – коэффициент молекулярной диффузии, которая зависит в общем случае от концентрации C и температуры Т; $\vec{n}$ – внешняя нормаль к поверхности. Знак минус указывает, что поток вещества направленный в сторону уменьшения концентрации вещества.

Если взвешенное вещество находится в подвижной со скоростью $\vec{V}$ – среде, то последняя захватывает его в своем движении. Рядом с диффузионным, при этом возникает конвективный поток (масса вещества, которое переносится средой через единицу площади в единицу времени): $\vec{J}_k = C\vec{V}.$ Полный поток вещества являет собой сумму конвективного и диффузионного потоков:

$$\vec{J} = \vec{J}_k + \vec{J}_d = \vec{V}C - DgradC. \tag{2}$$

Выделим в рассмотренной сплошной среде произвольный объем W, ограниченный поверхностью S. Пусть в рассмотренном объеме находится источник вещества, мощность которого равняется Q (мг/с).

На основе закона сохранение выплывает, что изменение массы вещества в объеме W в единицу времени равняется сумме массы вещества, которое проходит через поверхность, которая ограничивает данный объем, и приток вещества от источника. Принимая во внимание это положение и используя превращение поверхностное интегралу по формуле Остроградского-Гаусса [1] будем иметь:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + div\vec{V}C = div\left(DgradC\right) + G. \tag{3}$$

В прямоугольной декартовой системе координат уравнения конвективной диффузии в подвижной среде ламинарии запишется следующим образом:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_x \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D_y \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(D_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) + G, \tag{4}$$

где u, v, w – соответствующие компоненты скорости подвижной сплошной среды, которые в общем случае являются функциями координат и должны быть определенные из гидродинамической задачи; D_x, D_y, D_z – коэффициент молекулярной диффузии в соответствующих направлениях.

Можно конвертировать:

$$div(\vec{V}C) = \vec{V}gradC + Cdiv\vec{V}. \tag{5}$$

В силу несжимаемости среды $div\vec{V} = 0.$ Тогда уравнение для концентрации принимает вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \vec{V}gradC = div\left(DgadC\right) + G, \tag{6}$$

или

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{\partial C}{\partial x}+v\frac{\partial C}{\partial y}+w\frac{\partial C}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_x\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_y\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_z\frac{\partial C}{\partial z}\right)+G. \qquad (7)$$

Представим концентрацию вещества и скорость ветра в виде суммы среднего значения и малых пульсационных составляющих:

$$C=\overline{C}+C',\quad u=\overline{u}+u',\quad v=\overline{v}+v',\quad w=\overline{w}+w', \qquad (8)$$

причем

$$\overline{C}=\frac{1}{\Delta\tau}\int_t^{t+\Delta t}Cd\tau,\overline{u}=\frac{1}{\Delta\tau}\int_t^{t+\Delta t}ud\tau,\overline{v}=\frac{1}{\Delta\tau}\int_t^{t+\Delta t}vd\tau,\overline{w}=\frac{1}{\Delta\tau}\int_t^{t+\Delta t}wd\tau, \qquad (9)$$

$$\overline{C'}=\frac{1}{\Delta\tau}\int_t^{t+\Delta t}C'd\tau=0,\overline{u'}=\frac{1}{\Delta\tau}\int_t^{t+\Delta t}u'd\tau=0,\overline{v'}=\frac{1}{\Delta\tau}\int_t^{t+\Delta t}v'd\tau=0,\overline{w'}=\frac{1}{\Delta\tau}. \qquad (10)$$

В большинстве случаев молекулярным переносом возможно пренебречь и в этом случае будем иметь:

$$\frac{\partial\overline{N}}{\partial t}+u\frac{-\partial\overline{C}}{\partial x}+v\frac{-\partial\overline{C}}{\partial y}+w\frac{-\partial\overline{C}}{\partial z}=\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{tx}\frac{\partial\overline{C}}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{ty}\frac{\partial\overline{C}}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{tz}\frac{\partial\overline{C}}{\partial z}\right)+\overline{G}. \qquad (11)$$

Следовательно, конвективная диффузия описывается уравнением в частичных производных второго порядка с переменными коэффициентами. Для его решения необходимо знать распределение вещества в данной области в начальный момент времени (начальное условие), геометрию рассматриваемой области (безграничной, полуграничной или ограниченной среде) и закон взаимодействия исследуемой примеси с предельной поверхностью (предельное условие). Начальное условие записывается в следующем виде:

$$C(x,y,z,\tau)\big|_{t=0}=f(x,y,z). \qquad (12)$$

В качестве предельного условия на бесконечности задают, что концентрация при удалении от источника стремится к фоновому значению C_0 или к нулю:

$$C=C_0,\ \text{при}\ l\to\infty,$$

где l – расстояние к источнику.

На предельной поверхности условия выглядит сложнее. При задании концентрации вещества на предельной поверхности S в любой момент времени имеем предельное условие первого рода:

$$C(x, y, z, \tau)\big|_S = f_S\left(x^S, y^S, z^S, t\right). \tag{13}$$

В частном случае, концентрация в течении всего процесса поддерживается постоянной ($\overline{N}\big|_S = const$) или ровная нулю ($\overline{N}\big|_S = 0$).

Предельное условие второго рода заключается в задании плотности потоку вещества на предельную поверхность как функции времени:

$$-D_n \left.\frac{\partial C}{\partial n}\right|_S = f_S\left(x^S, y^S, z^S, t\right). \tag{14}$$

Самый простой случай однородного предельного условия второго рода состоит в постоянстве потока вещества на поверхность

$$-D_n \left.\frac{\partial C}{\partial n}\right|_S = \mu = const. \tag{15}$$

При исследовании распространения газоаэрозольных примесей в атмосфере, считают, что на поверхности земли выполняется условие отображения (поток вещества на поверхности равняется нулю):

$$-D_n \left.\frac{\partial C}{\partial n}\right|_S = 0. \tag{16}$$

Рассмотрим нелинейную задачу диффузии. Эта задача, при решении которой необходимо учитывать концентрационные зависимости коэффициенту диффузии D, коэффициенту массоотдачи в плотности внутренних источников массы.

Уравнение нелинейной, нестационарной диффузии записывается так:

$$\partial\widetilde{N} / \partial\tau = div\left[D(C) gradC(P,\tau)\right] + J(P,\tau), \quad P \in J, \quad \tau > 0, \tag{17}$$

$$C(P,\tau)\big|_{\tau=0} = .f(P), P \in J, \tag{18}$$

$$D(C)\partial C(P,\tau)/\partial n = \varphi(P,\tau), P \in F, \ \tau > 0. \tag{19}$$

Задача (17) – (19) описывает диффузию распределенного вещества в произвольной области G при неравномерном начальном распределении, предельному условию второго рода (19) и при общем виде зависимости коэффициента диффузии от концентрации распределенного вещества D(С) [2].

Для нелинейных дифференциальных уравнений диффузии не существует общих методов интегрирования, а также формул что позволяют получить решение в замкнутом виде. Поэтому ограничиваются в основном приближенным и решениями.

Решение приведенных зависимостей не составляет трудностей [3 – 6].

Изложенный метод расчета дает возможность определить не только степень выбросов в окружающую среду, но и динамику их изменения во времени или зависимости от принимаемых мер по их ограничению.

Проанализируем процесс диффузии в турбулентном потоке, для которого характерно, что как концентрация компонентов, так и скорости в каждой точке пространства имеет место беспорядочные изменения во времени (флуктуации, пульсации).

В случае установившегося турбулентного движения и стационарных внешних условий используется введенное Рейнольдсом временное осреднение

$$\langle C(x,y,z)\rangle = \frac{1}{t_0}\int_t^{t+t_0} C(x,y,z)dt, \tag{20}$$

где t_0 – выбранный соответствующим образом интервал времени.

Данное определение осредненной концентрации совпадает и со статистическим подходом к описанию турбулентного движения [7, 8], в соответствии с которым осредненной концентрацией называется математическое ожидание актуальной концентрации в данный момент времени в данной точке пространства.

При этих условиях уравнение диффузии в потоке имеет вид:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_x\frac{\partial C}{\partial x} + u_y\frac{\partial C}{\partial y} + u_z\frac{\partial C}{\partial z} = f(x,y,z,t) + \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(D\frac{\partial C}{\partial z}\right). \tag{21}$$

Во многих задачах диффузии газовый поток может рассматриваться как несжимаемый. В таком случае уравнение (21) записывается следующим образом [9]

$$\begin{gathered}\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial t} + \langle u_x\rangle\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial x} + \langle u_y\rangle\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial y} + \langle u_z\rangle\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial z} = \\ = f(x,y,z,t) + \frac{\partial}{\partial x}\left(D\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial x} - \langle u_x C\rangle\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial y} - \langle u_y C\rangle\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(D\frac{\partial\langle C\rangle}{\partial z} - \langle u_z C\rangle\right),\end{gathered} \tag{22}$$

Которая является уравнением диффузии в турбулентном потоке несжимаемой среды.

Заключение

Процесс молекулярной и кинетической диффузии подчиняются закономерностям классической гидродинамики. Исследование этих процессов для конкретного случая позволяет контролировать и определять пути по уменьшению распространения вредных выбросов.

Анализ диффузии в турбулентном потоке основывается на проведенных выше закономерностях. В каждом конкретном случае формулируются соответствующие граничные условия.

Список литературы

1. Тихонов А.Н. Уравнения математической физики / А. Н. Тихонов, А.А. Самарский – М.: «Наука», 1966. – 724 с.
2. Драганов Б.Х. Гидродинамика вредных выбросов в атмосферу // Теплотехника, 2011. – №3.
3. Абрамовский Е.Р. Приближенный метод расчета метеорологических показателей и поля концентраций загрязняющей примеси в пограничном слое атмосферы / Е.Р. Абрамовский, Е.В. Егоров, А.В. Хаминич // Вісник Дніпропетровського університету, серія «Механіка», Д.: Вид-во ДНУ, 2003. – Вип. 7, Т. і. – С. 73 - 83.
4. Бабенко Д.И. Тепломаеообмен. Метод расчета теплових и диффу- зионных потоков. Л.: Химия, 1986. – 144 с.
5. Crank I. The Matimatics of Diftuscon. Oxford: Clarendon Press, 1975. – 414 p.
6. Диффузия в химико-технологических процессах / С.П. Рудибашта, Э.М. Карташев – М.: Химия, 1993. – 208 с.
7. Гигродов А.Д. Турбулентное течение жидкости. – Л.: ЛПИ, 1982. – 82 с.
8. Рейнольдс А.Дж. Турбулентные течения в инженерных приложе- ниях. – М.: Энергия, 1979. – 405 с.

9. Калюжный Г.С. Диффузия газов и аэрозолей в турбулентных потоках / Г.С. Калюжный, А.А. Коваленко, В.И. Соколов, С.А. Минин // Луганск: Издательство ВУГУ, 1999. – 100 с.

Викладені закономірності молекулярної і кінетичної дифузії багато-компонентних шкідливих викидів. Наведено метод вирішення сформу- льованої математичної моделі.

Дифузійний потік, концентрація, нелінійна, нестаціонарна дифузія.

Presented patterns of molecular and kinetic multicomponent diffusion of harmful emissions. A method for solving the formulated mathematical model.

Diffusive flux, concentration, non-linear, time-dependent diffusion.