



УДК 628.3:51.001.57

DOI: 10.25514/CHS.2024.1.26002

Прогнозирование распространения вредных веществ в водном объекте при залповом сбросе неочищенных сточных вод с использованием методов математического моделирования

В. С. Гасилов¹, О. А. Тучкова¹✉, Л. И. Хайруллина¹, И. Р. Хайруллин¹

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, Россия, e-mail: touchkova-o-a@mail.ru

Поступила в редакцию: 28.12.23 г.; после доработки: 03.04.2024 г.; принята в печать: 10.04.2024 г.

Аннотация – Вопросы обеспечения безопасности окружающей среды в результате развития промышленных предприятий всегда очень актуальны. Развитие технологий и применение промышленными предприятиями в технологическом процессе различного вида оборудования вызывают реальную угрозу загрязнения водоемов сточными водами, которые содержат вредные и опасные вещества. Это в свою очередь может нанести колоссальный вред флоре и фауне водоемов. Поэтому очень важно определить возможные последствия техногенных чрезвычайных ситуаций, что позволит предусмотреть требуемые меры защиты и снизить вероятность загрязнения окружающей среды, в частности водоемов. Для этого используются различные методы математического моделирования. Математические модели с определенной погрешностью позволяют упрощенно описать движение водного потока. Рассмотрены одни из основных математических моделей структуры потоков. Показано на основании каких критериев осуществляется выбор той или иной модели. Представлен способ расчёта концентраций и времени пребывания вредных веществ на определенном участке водного пространства при залповом сбросе неочищенных сточных вод.

Ключевые слова: вредные вещества, загрязнение, сточные воды, математическое моделирование.

Simulation of chemical and ecological processes

UDC 628.3:51.001.57

DOI: 10.25514/CHS.2024.1.26002

Predicting the spread of harmful substances in a water body during bulk discharge of untreated wastewater using mathematical modeling methods

Vladislav S. Gasilov¹, Oksana A. Tuchkova¹✉, Liaisan I. Khairullina¹, and Irec R. Khairullin¹

¹Kazan National Research Technological University, Kazan, Russia,
e-mail: touchkova-o-a@mail.ru

Abstract – The issues of environmental safety as a result of the development of industrial enterprises are always very relevant. Development of technologies, application by industrial enterprises of various types of equipment in the technological process causes a real threat of pollution of water bodies with wastewater, which contains harmful and dangerous substances. This in turn can cause enormous damage to the flora and fauna of water bodies. Therefore, it is very important to determine the possible consequences of man-made emergencies, which will allow to provide the required protection measures and reduce the likelihood of pollution of the environment, in particular water bodies. For this purpose, various methods of mathematical modeling are used. Mathematical models with a certain error allow simplified description of water flow movement. Some of the basic mathematical models of the structure of flows are considered. It is shown on the basis of what criteria the choice of one or another model is made. The method of calculation of concentrations and residence time of harmful substances in a certain area of water space at volley discharge of untreated wastewater is presented.

Keywords: harmful substances, pollution, wastewater, mathematical modeling.

ВВЕДЕНИЕ

Вода – это химическое неорганическое соединение, является одним из самых важных компонентов жизни на Земле, обладает уникальными свойствами, благодаря которым обеспечивается поддержание стабильной среды обитания для множества видов жизни.

Вода интенсивно потребляется человеком в процессе его жизнедеятельности. Согласно «Водному кодексу Российской Федерации» использование воды подразделяется на водопользование и водопотребление [1].

Под водопользованием понимают использование воды, которая, оставаясь в границах водного объекта (водоём, водоток и т.п.), используется как водная экосистема или как ньютоновская жидкость в качестве механического источника энергии. К водопользователям относят: организации, занимающиеся рыбным промыслом, транспортировкой грузов по водным объектам, выработкой электроэнергии с использованием гидросооружений и т.п.

Водопотребление связано с забором воды из водных объектов (водоёмов и водотоков) и ее дальнейшее использование муниципальными службами для бытовых нужд населения, производственными объектами для реализации технологического процесса, сельскохозяйственными предприятиями для орошения земель сельскохозяйственного назначения и т.п.

В связи с масштабным развитием в Российской Федерации частного предпринимательства в сельском хозяйстве, бурным ростом промышленного производства с применением современных технологий и развитием транспортной инфраструктуры повышается реальная угроза загрязнения водных объектов аварийно-химически опасными веществами (АХОВ).

Источники загрязнения водных объектов по временному фактору подразделяются на две категории:

– источники загрязнения, существующие продолжительное время, т.е. источники, характеризующиеся относительно небольшой концентрацией

вредных веществ, но загрязняющие водоём в течение длительного времени (стоки с объектов коммунального хозяйства, с очистных сооружений опасных производственных объектов, с земель сельскохозяйственного назначения и т.п.);

- сбросы (разовые), для которых характерно сбрасывание в водный объект за небольшой промежуток времени значительного количества жидкости с высокой концентрацией АХОВ. Подобного рода сбросы называются «залповыми сбросами», которые могут иметь место, в основном, при чрезвычайных ситуациях антропогенного происхождения, вызванные авариями на взрывопожароопасных и химически опасных производственных объектах, авариях на водном транспорте, в результате которых в атмосферу и водные объекты выбрасывается большое количество АХОВ.

В связи с этим, значительный интерес представляет возможность заблаговременного прогнозирования последствий техногенных чрезвычайных ситуаций на водных объектах, т.е. масштаба распространения вредных веществ в водоеме и времени восстановления концентрации АХОВ в водной среде до безопасного уровня в конкретной точке водного объекта.

Для этих целей применяются различные научные подходы, к которым относятся и методы математического моделирования. Основы динамики жидкости изложены в работе Дж. Бэтчелора [2].

Создать математическую модель – это значит приближенно, но сохраняя значимые особенности реального объекта, описать реальный физический процесс с использованием математического аппарата (математических формул), что предполагает выполнение следующих пунктов:

- выбор математической модели для исследуемого объекта (процесса);
- разработка последовательности вычисления (алгоритма) по выбранной математической модели;
- реализация математической модели исследуемого процесса.

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

Для расчёта концентраций и времени пребывания вредных веществ на определённом участке водного пространства (акватории) при залповом сбросе неочищенных сточных вод (жидкости с большим содержанием АХОВ) предлагается использовать подход, апробированный при исследовании структуры жидкостных потоков в колонных аппаратах, что сводится к исследованию продольного перемешивания при течении жидкостного потока в неограниченном канале [3, 4], т.к. на реальном водном объекте также имеют место такие явления, как перемешивание и неравномерность времени пребывания частиц жидкости в определённом объёме канала (водоёма).

Перемешивание частиц жидкости в русле канала происходит либо под действием турбулентных пульсаций, либо из-за неравномерности распределения скоростей частиц в жидкостном потоке. Это основные факторы, вызывающие продольные перемешивания, т.е. смешения частиц жидкости, которые недавно поступили в канал (водоём) с частицами жидкости, которые уже находились в указанном канале (водоеме).

Учитывая продольное перемешивание для каждого жидкостного потока, можно построить его математическую модель, которая упрощает сложную картину реального водного потока, но позволяет с определенной погрешностью просчитать особенности его течения.

Существует несколько типовых математических моделей структуры потоков [3, 4]:

1. Модель идеального вытеснения:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -U \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (1)$$

где: C – размерная концентрация вещества, $\text{кг}/\text{м}^3$; τ – размерное время, с; x – линейная координата, м; U – линейная скорость потока, м/с.

В соответствии с данной моделью принимается такое течение жидкостного потока, когда концентрация вещества равномерно распределена по сечению, перпендикулярном направлению движения потока в исследуемом канале, но полностью отсутствует перемешивание в потоке по направлению его движения. Подобного рода движение жидкостного потока в неограниченном канале называется «поршневым течением».

2. Модель идеального смешения:

$$\frac{dC}{d\tau} = \frac{W}{V} \cdot (C_{\text{вх}} - C_{\text{вых}}), \quad (2)$$

где: C – размерная концентрация вещества, $\text{кг}/\text{м}^3$; τ – размерное время, с; W – объемная скорость потока, $\text{м}^3/\text{с}$; V – объем водного участка, м^3 ; $C_{\text{вх}}$, $C_{\text{вых}}$ – входная и выходная размерная концентрация вещества, $\text{кг}/\text{м}^3$.

В соответствии с данной моделью принимается равномерное распределение концентрации вещества по всему объему исследуемого канала (потока).

3. Диффузионная модель (однопараметрическая):

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -U \frac{\partial C}{\partial x} + D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3)$$

где: C – размерная концентрация вещества, $\text{кг}/\text{м}^3$; τ – размерное время, с; U – линейная скорость потока, м/с; x – линейная координата, м; D_L – коэффициент продольного перемешивания, $\text{м}^2/\text{с}$.

Основой диффузионной модели является модель идеального вытеснения, на которую накладывается смешение частиц жидкости, которые недавно поступили в канал с частицами жидкости, которые уже находились в указанном канале, т.е. обратное перемешивание, подчиняющееся закону диффузии Фика. Параметрами, характеризующими диффузионную модель жидкостного потока, служат: коэффициент продольного перемешивания D_L и число Пекле Pe [3].

При составлении данной модели принимаются следующие допущения:

- распределение концентрации вещества (трассера) является непрерывной функцией;
- концентрация вещества (трассера) по сечению жидкостного потока не меняется;

– линейная скорость потока U (м/с) и коэффициент продольного перемешивания D_L (м²/с) для конкретного жидкостного потока являются постоянными, т. е. не изменяются по длине и сечению исследуемого канала.

Другие существующие математические модели являются производными от вышеуказанных математических моделей.

Какая математическая модель соответствует структуре реального жидкостного потока определяют экспериментальным путем. Проведение эксперимента по исследованию распространения загрязняющих веществ на реальном водном объекте проблематично, это связано со значительными масштабами объектов исследования и длительностью по времени протекания процессов конвекции и диффузии, что, в свою очередь, представляет определенную сложность по наблюдению за ходом эксперимента.

В случаях, когда проведение экспериментов, связанных с загрязнением реальных водных объектов исключается, применяют уменьшенную физическую копию реального водного объекта.

При этом реальный водный объект (исследуемый участок) должен отвечать следующим условиям:

- выбранный для исследования участок должен быть характерным для реального водного объекта (реки);
- русло водного объекта (реки) на рассматриваемом участке должно быть однообразным, относительно прямолинейным, по руслу исследуемого канала (реки) не должно быть никаких гидротехнических сооружений, влияющих на уровень воды, объемную и линейную скорости течения или способствующих образованию застойных зон.

Эксперимент на физической модели реального водного объекта можно проводить различными методами.

Для этой цели широкое распространение получили методы ступенчатого и импульсного внесения возмущения (введение трассера) в поток экспериментальной ячейки (рис. 1). В качестве возмущающего сигнала в поток вводят трассер (краситель, солевой раствор и т.п.) химически не взаимодействующий со средой и не участвующий в массообмене.

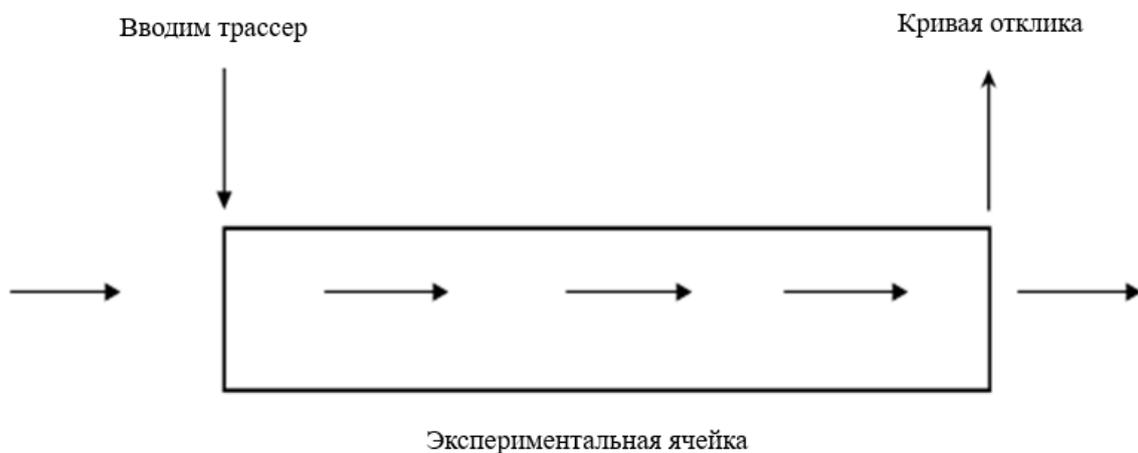


Рис. 1. Экспериментальная ячейка.

Fig. 1. Experimental cell.

На выходе из экспериментальной ячейки снимается кривая отклика (рис. 2).

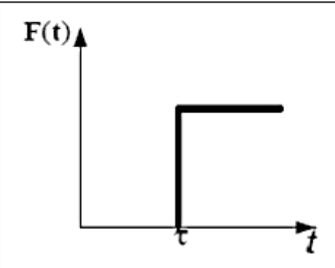
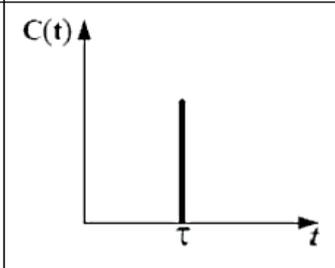
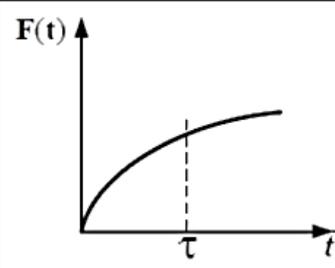
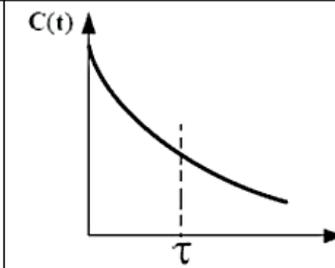
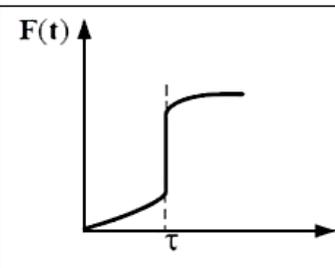
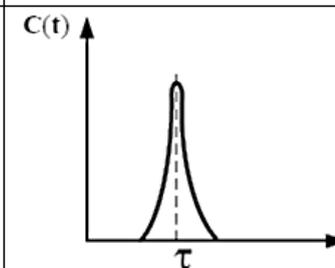
	Характер отклика при возмущении	
	ступенчатом	импульсном
Модель идеального вытеснения		
Модель идеального смешения		
Диффузионная модель		

Рис. 2. Кривые отклика для различных гидродинамических моделей при ступенчатом и импульсном внесении возмущения в исследуемый жидкостной поток.

Fig. 2. Response curves for different hydrodynamic models at step and pulse introduction of perturbation into the investigated fluid flow.

Функцию, описывающую изменение концентрации трассера в потоке при импульсном возмущении (вводе трассера), называют С-кривой.

F-кривой называют функцию отклика, описывающую изменение концентрации трассера в потоке при ступенчатом возмущении (вводе трассера), когда концентрация возмущения (трассера) во входящем потоке изменяется ступенчато от нуля до некоторого постоянного значения [3, 5].

Указанные функции можно описать следующими формулами:

$$\int_0^{\infty} s(t) dt = 1, \quad F(t) = \int_0^t s(t) dt, \quad (4)$$

где: s – безразмерная концентрация трассера; t – безразмерное время.

В данной работе рассматривается внесение импульсного возмущения (трассера) в исследуемый жидкостной поток.

Для определения параметров кривой отклика при импульсном внесении возмущения в исследуемый жидкостной поток, используют методы статистического анализа (метод моментов) [3, 6], предусматривающие выполнение следующих пунктов:

1) Кривая отклика (С-кривая) обсчитывается численно, для чего С-кривая разбивается по координате τ на интервалы с равным шагом, и в найденных точках определяются величины τ_i и ординаты кривой отклика Z_i (мм) (рис. 3).

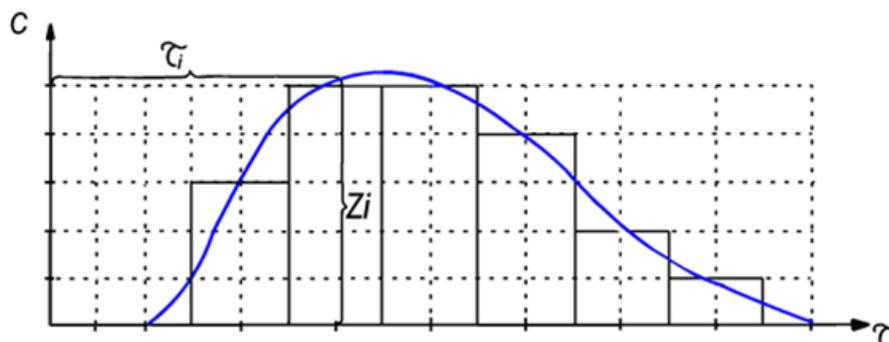


Рис. 3. Кривая отклика (С-кривая).

Fig. 3. Response curve (C-curve).

Для перехода к размерной концентрации применяется коэффициент пропорциональности K , т.е. $C_i = K \cdot Z_i$, а так как в дальнейших расчетах коэффициент K значения иметь не будет, можно принять $C_i = Z_i$. При этом пренебрегаем хвостом С-кривой после $C \approx 0,03C_{\max}$ [5].

2) Размерное среднее время пребывания $\tau_{\text{ср}}$, с, трассера в экспериментальной ячейке (канале) определяется по формуле:

$$\tau_{\text{ср}} = \frac{\sum_{i=1}^n \tau_i \cdot C_i}{\sum_{i=1}^n C_i} \quad (5)$$

3) По формулам (6) ÷ (8) рассчитываются безразмерные значения времени и концентрации трассера:

$$t_i = \frac{\tau_i}{\tau_{\text{ср}}}, \quad (6)$$

$$S_i = \frac{C_i}{\sum_{i=1}^n C_i \cdot \Delta t}, \quad (7)$$

где $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ (8)

4) Расчёт первого (M_1), второго (M_2) начальных и второго центрального (σ^2) статистических моментов рассчитывается по формулам (9) ÷ (11):

$$M_1 = \frac{\sum_{i=1}^n S_i \cdot t_i}{\sum_{i=1}^n S_i} \quad (9)$$

$$M_2 = \frac{\sum_{i=1}^n S_i \cdot t_i^2}{\sum_{i=1}^n S_i} \quad (10)$$

$$\sigma^2 = M_2 - (M_1)^2 = \frac{\sum_{i=1}^n S_i \cdot t_i^2}{\sum_{i=1}^n S_i} - \left[\frac{\sum_{i=1}^n S_i \cdot t_i}{\sum_{i=1}^n S_i} \right]^2, \quad (11)$$

где: M_1 – первый начальный статистический момент; M_2 – второй начальный статистический момент; σ^2 – второй центральный статистический момент (квадрат дисперсии).

Если квадрат дисперсии $\sigma^2 \approx 1$, то структура потока жидкости в экспериментальной ячейке (рисунок 1) соответствует математической модели

идеального перемешивания, если $\sigma^2 \approx 0$ – модели идеального вытеснения, если $0 < \sigma^2 < 1$ – диффузионной модели [3, 4].

Случай, когда в результате расчета получается $\sigma^2 > 1$, физического смысла не имеет и свидетельствует о некорректности математического счета.

Модели идеального перемешивания и идеального вытеснения на реальных водных объектах практически не достижимы, поэтому в данном случае не рассматривается.

При $0 < \sigma^2 < 1$ считаем, что в экспериментальной ячейке (канале) имеет место диффузионная модель течения жидкостного потока, а безразмерная выходная концентрация трассера из экспериментальной ячейки (канала) (рисунок 1) определяется выражением (12), [3].

$$S = \frac{1}{2 \cdot \sqrt{\frac{\pi t}{Pe}}} \cdot \exp \left[-\frac{(1-t)^2 \cdot Pe}{4t} \right], \quad (12)$$

$$S = \frac{C \cdot V}{Q}, \quad (13)$$

$$Pe = \frac{U \cdot L}{D_L}, \quad (14)$$

$$t = \frac{W}{V} \cdot \tau, \quad (15)$$

$$\sigma^2 \approx \frac{8}{Pe^2} + \frac{2}{Pe}. \quad (16)$$

где: C – размерная концентрация, кг/м³; V – объём исследуемого потока (канала экспериментальной ячейки), м³; U – линейная скорость потока, м/с; L – линейный размер исследуемого канала, м; Q – количество, поступившего трассера (загрязняющего вещества), кг; W – объёмная скорость потока, м³/с; τ – размерное время, с; S – безразмерная концентрация; t – безразмерное время; Pe – число Пекле (характеризует отношение конвективного массопереноса к диффузионному); D_L – коэффициент продольного перемешивания, м²/с.

Задача по расчету времени, соответствующему максимальной концентрации вредных веществ в определенном районе водного объекта сводится к нахождению экстремума функции (12), т.е. продифференцировав выражение (12) по времени t и приравняв его к нулю, можно найти время, соответствующее максимальной концентрации вредного вещества в определенной точке водного объекта.

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{1}{2 \cdot \sqrt{\frac{\pi t}{Pe}}} \cdot \exp \left[-\frac{Pe(1-t)^2}{4t} \right] \right\} = 0, \quad (17)$$

$$t = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{Pe}\right)^2 + 1 + \frac{1}{Pe}}}, \quad (18)$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, зная параметры реального водного объекта, можно провести масштабирование и, используя выражения (12) ÷ (16), рассчитать размерные концентрации АХОВ в определенное время и на конкретном участке рассматриваемого реального водного объекта (реки) при залповом сбросе опасных веществ. Для этого в ходе экспериментального исследования с использованием уменьшенной физической копии реального водного объекта определяется структура потока жидкости по формулам (5) ÷ (11).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

CONFLICT OF INTERESTS:

The authors declare no conflict of interests.

Список литературы:

1. Федеральный закон от 3 июня 2006 года № 74-ФЗ «Водный кодекс Российской Федерации».
2. Бэтчелор Дж. (1973). *Введение в динамику жидкости*. Перевод с английского Вахомчика, В.П. и Попова А.С. под редакцией Степанова Г.Ю. М.: Издательство «Мир».
3. Гельперин Н.И., Пebaлк В.Л., Костаньяк А.Е. (1977). *Структура потоков и эффективность колонных аппаратов в химической промышленности*. М.: Химия. 261 с.
4. Кафаров В.В. (1968). *Моделирование химических процессов*. М.: Знание. 62 с.
5. Закгейм А.Ю. (1982). *Введение в моделирование химико-технологических процессов*. М.: Химия. 288 с.
6. Кацман Ю.Я. (2013). *Теория вероятностей, математическая статистика и случайные процессы: Учебник*. Томск: Издательство Томского политехнического университета. 131 с. https://portal.tpu.ru/SHARED/k/KATSMAN/methodwork/Tab4/Book_Katsman_Prob.pdf (дата обращения: 06.12.2023).

References:

1. Water Code of the Russian Federation. Federal law of the Russian Federation of June 3, 2006, No. 74-FL (in Russ).
2. Batchelor, G.K. (1970). *An Introduction to Fluid Dynamics*. New York: Cambridge University Press.
3. Gelperin, N.I., Pebalk, V.L. & Kostanyak, A.E. (1977). Flow structure and efficiency of column apparatus in the chemical industry. M.: Chemistry. P. 261 (in Russ).
4. Kafarov, V.V. (1968). Modeling of chemical processes. M.: Knowledge. P. 62 (in Russ).
5. Zakheim, A.Yu. (1982). Introduction to modeling of chemical-technological processes. M.: Chemistry. P. 288 (in Russ).
6. Katzman, Y.Ya. (2013). Probability theory, mathematical statistics and random processes: uchebnik. Tomsk: Izdatel'stvo Tomskogo politekhnicheskogo universiteta. P. 131 https://portal.tpu.ru/SHARED/k/KATSMAN/methodwork/Tab4/Book_Katsman_Prob.pdf (accessed: 06.12.2023) (in Russ).