

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} ((\rho E + P)u_k + q_k - \tau_{ik}u_i) = S_k u_k + Q_H \quad (3)$$

где t - время, u - скорость текучей среды, ρ - плотность текучей среды, P - давление текучей среды, S_i - внешние массовые силы, действующие на единичную массу текучей среды: $S_{iporous}$ - действие сопротивления пористого тела, $S_{igravity}$ - действие гравитации, $S_{irotation}$ - действие вращения системы координат, т. е.

$$S_i = S_{iporous} + S_{igravity} + S_{irotation} \quad (4)$$

E - полная энергия единичной массы текучей среды, Q_H - тепло, выделяемое тепловым источником в единичном объеме текучей среды, τ_{ik} - тензор вязких сдвиговых напряжений, q_i - диффузионный тепловой поток, нижние индексы означают суммирование по трем координатным направлениям.

Для нахождения искомого численного решения задачи непрерывная нестационарная математическая модель физических процессов дискретизируется как по пространству, так и по времени. Чтобы выполнить дискретизацию по пространству, вся расчетная область циклофильтра, занятая текучей средой (воздухом), покрывается расчетной сеткой, грани ячеек, которой параллельны координатным плоскостям X , Y и Z . Ячейки расчетной сетки имеют форму параллелепипеда $30 \times 30 \times 90$. При расчете поведения текучей среды в ограниченной стенками модели области, используется так называемый метод фиктивных областей, т.е. формально расчетная сетка строится параллелепипеду образной области, покрывающей модель с текучей средой внутри. При моделировании аэродинамики циклофильтра разбивался на сечения по всей его высоте. Начало координат привязывали ко дну циклофильтра, причем ось X направлена перпендикулярно входному потоку, ось Y – по направлению входного потока, ось Z направлена от дна циклофильтра (от бункера) в направлении выходного патрубка. В результате моделирования получен массив данных, по которым построены зависимости изменения компонент скоростей потока по ширине аппарата. Численное решение систем дифференциальных уравнений в частных производных производилось в программной среде Solid Works [4]. Результаты расчета программа SolidWorks выдает в виде графических изображений распределения потоков.

Данная разработка может быть использована для разнообразных технологических систем очистки газовых сред путём проведения компьютерного моделирования и дополнительных исследований на пригодность к применению в конкретных условиях с практическим увеличением эффективности очистки воздуха.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Коузов, П.А., Очистка газов и воздуха от пыли в химической промышленности [Текст] / П.А. Коузов, А.Д. Мальгин, Г.М. Скрыбин – Л.: Химия, 1993. – 320 с.
2. Плашихин С.В. Извлечение твердой фазы из газовой среды в циклоне с тангенциальным подводом [Текст] / С.В. Плашихин, Ю.А. Безносик, Д.А. Серебрянский // Восточно-Европейский журнал передовых технологий, 2010. - № 2/10(44) – с.43 – 45.
3. Плашихин С.В. Разработка и моделирование циклофильтра для очистки газовых сред [Текст] / С.В. Плашихин, Ю.Н. Павлинский, Д.А. Серебрянский, Ю.А. Безносик // Восточно-Европейский журнал передовых технологий, 2010, № 4/8 (46). – с. 42-44.
4. Алямовский А.А. SolidWorks. Компьютерное моделирование в современной практике [Текст] / А.А. Алямовский, А.А. Собачкин, Е.В. Одинцов – СПб.: БХВ- Петербург, 2005. – 800с.

УДК 504.064.2.001.18+551.554

Бойко В. В., Пляцук Л. Д. (Україна, Суми)

ВИЗНАЧЕННЯ КОЕФІЦІЕНТУ ВЕРТИКАЛЬНОГО ТУРБУЛЕНТНОГО ОБМІНУ ПРИ МОДЕЛЮВАННІ РОЗСПОВАННЯ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН В АТМОСФЕРІ

Коротка характеристика та актуальність проблеми

На сьогоднішній час більшість регіонів України відноситься до районів з інтенсивним рівнем техногенного навантаження та навколишнє середовище. Розвинута мережа транспортних магістралей, діяльність об'єктів паливно-енергетичного комплексу, гірничо-видобувної та хімічної промисловостей, підприємств чорної металургії та машинобудування обумовлює зростаючу кількість викидів у атмосферу. Емісії забруднюючих речовин підвищують ймовірність виникнення екологічного ризику для навколишнього середовища та, як наслідок, здоров'я людини. Одним з перспективним шляхів для оцінки та прогнозування екологічних ризиків, викликаних техногенним чинником є математичне моделювання. Його застосування в задачі моніторингу якості атмосферного повітря дозволяє встановити кореляційні причинно-наслідкові зв'язки при забрудненні атмосфери, наприклад, між навантаженням на повітряне середовище, кількісним та якісним складом викидів від промислових джерел та станом атмосфери. Крім того, актуальність дослідження полягає в тому, що результати моделювання дозволяють не тільки прогнозувати стан атмосфери, але й приймати управлінські рішення з метою нормування та контролю обсягів викидів для мінімізації техногенного впливу на навколишнє середовище.

За даними U.S. Environmental Protection Agency[1] та European Environment Agency[2] нині існує більш ніж 140 моделей забруднень повітря, за допомогою яких можна розраховувати концентрації забруднюючих речовин

від стаціонарних та пересувних джерел викидів. Серед зарубіжних моделей варто відмітити ADREA/DIPCOТ (Греція), PLUME (Болгарія), LASAT (Німеччина), ADMS (Великобританія), ISC (США), AERMOD (США, Канада), більшість з яких покладено у відповідні діючі нормативні методики для регулювання якості атмосферного повітря [3]. Вітчизняні моделі розповсюдження забруднюючих речовин описані у роботах М.Е. Берлянда [4], Є.А. Самарської [5], Н.Л.Бизової [6]. Всі ці моделі мають математичний апарат різні граничні умови, різний ступінь складності та параметризації, і призначені для розрахунку як окремих домішок так і багатокомпонентних сумішей поллютантів. Але незважаючи на це, до теперішнього часу немає єдиної моделі, що дозволяє проводити однакові розрахунки розподілу концентрацій шкідливих речовин в атмосфері.

Тому, для України, що адаптує свою нормативну базу, у тому числі і в області моніторингу якості атмосферного повітря, до вимог ЄС, важливим завданням є вибір математичної моделі забруднення атмосферного повітря [7].

Формулювання завдання

Процес розсіяння домішок в результаті явища атмосферної турбулентної дифузії є складним фізичний процес, який не має строгого теоретичного опису при різноманітних природних умовах. Створені теоретичні моделі описують розсіяння домішки в умовах горизонтально однорідної підстилаючої поверхні в стратифікованій атмосфері з заданими метеорологічними параметрами та при однорідних граничних умовах. У реальних природних умовах ці умови ніколи не виконуються, тому при кількісній інтерпретації експериментальних даних за допомогою того або іншого теоретичного опису, завжди уточнюється область застосовності наближення для математичного апарату.

Вкажемо проблеми, що виникають при розв'язанні задачі з використанням існуючих моделей. Передусім, питання опису розсіяння домішки в нестационарній стратифікованій атмосфері, включаючи температурну та динамічну неоднорідність, тобто залежність метеорологічних параметрів (температурного та вітрового режиму) та коефіцієнтів турбулентної дифузії від висоти.

Врахування параметрів атмосферної турбулентної дифузії, що впливають на процес розсіювання домішки визначається за допомогою системи рівнянь або за емпіричними даними (гаусові моделі) з використанням граничних умов та вхідних параметрів. При цьому важливо співвідносити розрахункові та вимірювані величини. На жаль, поки реалізувати комплексні дослідження проблеми про розсіювання домішки в реальній атмосфері в єдиному експерименті не вдалося.

Проблеми, пов'язані з неоднорідністю атмосфери за висотою, призводять до необхідності створення моделей, які при описі розсіювання домішок представлятимуть атмосферу як середовище, що складається з декількох шарів, в кожному з яких фізичні параметри майже не змінюються і приблизно можуть вважатися величинами постійними. Це дозволяє при постановці завдання використати рівняння з постійними коефіцієнтами, проте їх усереднення приводить до появи похибки близько 25%, що неприпустимо для прогнозу оцінки якості повітря. Для вирішення цього питання потрібно уточнення параметрів турбулентної дифузії, а саме, коефіцієнту турбулентного обміну в залежності від висоти.

Характеристика методу розв'язання задачі та отримані результати

Відомо [8], що товщина шару повітря, в якому відбувається розсіяння домішки від промислового підприємства, може бути дуже значною, особливо у випадках потужних джерел з висотою труб 100-200 м, викиди від яких поширюються на великі відстані.

У цьому шарі зміни швидкості вітру і складових коефіцієнта турбулентності мають складний характер. Необхідно прийняти їх реальний розподіл по усьому шару поширення домішки.

У межах приземного шару швидкість і температура є логарифмічними функціями висоти, а коефіцієнт турбулентного обміну зростає пропорційно висоті.

В процесі перенесення забруднююча речовина від стаціонарного джерела викидів може зазнавати зміни, вступаючи у фізичну і хімічну взаємодію з частками докільця і іншими домішками, які змінюють механічні, фізичні і хімічні властивості забруднюючих речовин.

Кількісна сторона зміни вмісту забруднюючих речовин у просторі описується рівнянням турбулентного перенесення [9].

$$f(x, y, z) = \frac{\partial(u\varphi)}{\partial x} + \frac{\partial(v\varphi)}{\partial y} + \frac{\partial(w\varphi)}{\partial z} + \sigma\varphi - k_{x,y} \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) - k_z \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2}, \quad (1)$$

де $\varphi(x, y, z)$ – інтенсивність (концентрація) забруднюючих речовин, мігруючих разом з потоком середовища (води або повітря);

$k_{x,y}$ і k_z – коефіцієнти горизонтальної і вертикальної дифузії відповідно;

σ – коефіцієнт поглинання домішки (це величина, зворотна інтервалу часу, за який концентрація забруднюючої речовини в порівнянні з початковою інтенсивністю y_0 зменшиться в n разів);

F – функція, що описує внутрішні джерела викиду забруднюючих речовин.

Розглянемо випадок поширення домішки в атмосферному шарі за вертикальним профілем. У пограничному шарі можна виділити декілька підшарів, в межах яких характерні свої значення вітрових потоків і коефіцієнтів турбулентної дифузії [8].

Передбачається, що фізичні параметри коефіцієнтів горизонтальної і вертикальної дифузії усередині підшару є величинами постійними і описуються за допомогою деякої залежності від висоти.

При розв'язанні рівняння (1) передбачається, що дифузія домішки існує тільки в поперечному і вертикальному напрямі до вектору перенесення, а розсіювання домішки за напрямом руху відсутнє. Окрім цього "апріорі" передбачалося, що процеси горизонтальної (за віссю y) і вертикальної (за віссю z) дифузії незалежні. У загальному випадку коефіцієнт турбулентного обміну залежить від висоти і часу.

Розглянемо розподіл коефіцієнта турбулентної дифузії в атмосфері у просторі та часі за вертикальним профілем. При дослідженні розподілу коефіцієнта турбулентності були розглянуті декілька різних моделей для коефіцієнта турбулентності з побудовою розв'язків рівнянь, що відповідали їм [8]:

- 1) коефіцієнт турбулентності – постійна (у часі та за висотою) величина;
- 2) коефіцієнт турбулентності – лінійно-зростаюча функція висоти в межах усього пограничного шару;
- 3) коефіцієнт турбулентності – експоненціальна функція висоти;
- 4) коефіцієнт турбулентності – лінійно-зростаюча функція висоти в приземному шарі і постійна величина вище нього (модель із зломом);
- 5) коефіцієнт турбулентності – періодична функція часу.

Після експериментальної перевірки даних було знайдено невідповідність між розв'язками рівнянь моделей (1-3) і результатами натурних вимірів. А середньоквадратичні відхилення між експериментальними даними і розв'язками рівнянь моделей (4-5) склали близько 10 %.

Таким чином, при моделюванні просторового розподілу коефіцієнта турбулентної дифузії передбачалося, що коефіцієнт турбулентності є лінійно-зростаючою функцією висоти в приземному шарі та постійною величиною вище за шар перемішування. Модель залежності коефіцієнта турбулентного обміну від висоти можна записати у вигляді рівнянь:

$$k_z = \begin{cases} k_0 + k_1 z & 0 \leq z \leq h \\ k_0 + k_1 h & h \leq z \leq \infty \end{cases} \quad (2)$$

де $\overline{k_z}$ - середньодобова величина k на висоті z , νk_z - амплітуда добового ходу k на тій же висоті z .

У разі розв'язання системи рівнянь при моделі із зломом при залежності k від z в приземному шарі рішення виражається через лінійні функції, вище за приземний шар - через експоненціальні відповідно при $z \leq h$ і $z \geq h$.

Для визначення постійних інтегрування використовуються окрім граничних умов при $z=0$ і $z \rightarrow \infty$, також умови спряження, які зводяться до вимоги безперервності функції за висотою на верхній межі приземного шару при $z=h$.

Таким чином, підставивши (2) (1) з урахуванням вертикального профілю потік домішок, обумовлений турбулентним обміном, сумарне рівняння для потоку домішок у приземному та пограничному шару після деяких спрощень можна записати у вигляді системи рівнянь:

$$\begin{cases} u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + w \frac{\partial \varphi}{\partial z} = K_y \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + (k_0 + k_{z1} z) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} & 0 \leq z \leq h \\ u \frac{\partial \varphi}{\partial x} + w \frac{\partial \varphi}{\partial z} = K_y \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + (k_0 + k_{z1} h) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} & h \leq z \leq \infty \end{cases} \quad (3)$$

З метою верифікації моделі та визначення її впливу на адекватність загальної моделі розсіювання проведені обчислювальні експерименти з розрахунком поширення домішок в результаті викидів від ТОВ «Сумитеплоенерго». Використовувався варіант моделі із заданою температурою домішки в умовах атмосферної ізотермії. Результати розрахунку порівнювалися з результатами подібного розрахунку, але виконаного без урахування моделі із зломом для вертикального профілю коефіцієнта турбулентної дифузії.

З'ясувалося, що введення моделі із зломом з уточненням залежності коефіцієнта турбулентної дифузії від висоти в приземному та пограничному шарах атмосфери, впливає на перерозподіл концентрацій оксидів сірки та оксиду вуглецю в пограничному шарі.

Висновки

Необхідність врахування та уточнення розподілу коефіцієнту турбулентності з висотою викликана проблемним питанням з'ясування взаємозв'язку метеопараметрів і полів концентрацій викидів від промислових джерел.

Досі врахування при моделюванні розсіювання домішок впливу метеорологічних чинників на динамічний і енергетичний баланси нижнього шару атмосфери призвело до появи таких надскладні моделі, як, наприклад, ICSC3 [1]. Але такі моделі, внаслідок перевантаженості через спробу безпосередньо врахувати усі фізико-хімічні процеси в пограничному шарі, виявилися дуже вимогливими до обчислювальної потужності, а також малопридатними для інтерактивної взаємодії з моделями загальної циркуляції атмосфери.

Тому пріоритетним завданням є побудова саме малопараметричної моделі нижніх шарів атмосфери як, в першу чергу, чинника, що впливає на трансформацію енергетичних потоків між підшарами, та інтеграція такої моделі в загальну обчислювальну модель розсіювання.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Preferred/Recommended Models//Technology Transfer Network Support Center for Regulatory Atmospheric Modeling. - U.S. EPA. – http://www.epa.gov/ttn/scram/dispersion_prefrec.htm
2. Report Environmental Statement // European Environmental Agency. – <http://www.eea.europa.eu>

3. Whole Model's Catalogue:Database //European Topic Centre on Air and Climate Change. – <http://pandora.meng.auth.gr>
4. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеоздат, 1975. – 439 с.
5. Самарская Е. А., Сузан Д. В., Тишкин В. Ф., Построение математической модели распространения загрязнения в атмосфере // Математическое моделирование. – 1997. – Т. 9, № 11. – С. 59-71.
6. Бызова Н.Л., Гаргер Е.К., Иванов В.Н. Экспериментальные исследования атмосферной диффузии и расчеты рассеяния примеси. – Л.: Гидрометеоздат, 1991. – 278 с.
7. Степаненко С.М., Волошин В.Г. Ейлерова K-GDM модель розрахунку концентрації в атмосферному повітрі шкідливих речовин, які містяться у викидах промислових підприємств // Гідрометеорологічний журнал. – 2009. – № 5. – С.5-14.
8. Матвеев Л.Т. Основы общей метеорологии. Физика атмосферы. – Л.: Гидрометеоздат, 1965. – 876 с.
9. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука. – 1982. – 320 с.

УДК 547-544:632.954

Манько Ю. П., Шатурський Я. П., Якубович Т. М., Бухтіяров В. К. (Україна, Київ), Найдан В. М., Смаліус В. В. (Україна, Черкаси)

ВИВЧЕННЯ ГЕРБІСТАТНОЇ АКТИВНОСТІ АРИЛСУЛЬФОНІЛХЛОРОБУТЕНІВ ТА АРИЛСУЛЬФОНІЛАРИЛХЛОРОБУТЕНІВ У КУРСІ «МЕТОДИ ЗНЕШКОДЖЕННЯ ЗАСОБІВ ХІМІЗАЦІЇ»

Використання досягнень сучасної органічної хімії є однією з умов інтенсифікації сільського господарства та інших галузей агропромислового комплексу. Згідно з навчальним планом підготовки магістрів з напрямку 0929 «Біотехнологія» зі спеціальності 6.051401 – «Екобіотехнологія» на вивчення дисципліни «Методи знешкодження засобів хімізації» відведено 114 годин, з яких: лекційних – 10 години, лабораторних занять – 20 години. Загальна направленість програми полягає в тому, щоб розвинути у студентів наукове мислення, прищепити навички творчого вирішення практичних завдань з екології та біотехнології. Саме тому на самостійну роботу студента виділено 84 години.

З метою навчити студентів-магістрів працювати з пестицидами вони залучалися до досліджень гербістатної активності нових речовин арилсульфонілхлоробутенів та арилсульфоніларилхлоробутенів, синтезованих творчим колективом кафедри органічної хімії Черкаського національного університету ім. Б. Хмельницького за участю викладачів кафедри органічної хімії та хімії пестицидів Національного університету біоресурсів і природокористування України. Серед досліджених сполук виявлені речовини, які в концентраціях 0,01-0,001 % викликають повну втрату насінням бур'янів схожості за рахунок відмирання їх зародка або переходу його у стан спокою. Одним із основних факторів утворення фактичної забур'яненості посівів сільськогосподарських культур є наявність життєздатного насіння бур'янів у верхній частині орного шару. Ефективність контролю бур'янів у сучасному землеробстві значною мірою обмежується стійкою біологічною активністю цього насіння, а саме: великим проміжком часу збереження життєздатності в ґрунті та розтягнутим строком проростання.

Актуальна забур'яненість посівів сільськогосподарських культур виникає за функцією наявності в ґрунті насіннєвих і вегетативних зачатків бур'янів. У зв'язку з цим одним з конструктивних стратегічних напрямків ефективного контролю актуальної забур'яненості полів об'єктивно виступає суттєве зменшення запасів цих зачатків прямою дією засобами позбавлення їх життєздатності, які дістали назву гербістатів [1]. Дослідження в цьому напрямку в Україні [2, 3] проведені в недостатньому обсязі й вимагають посиленої уваги.

Матеріал і методика досліджень. Гербістатну активність арилсульфонілхлоробутенів та арилсульфоніларилхлоробутенів визначали в лабораторії гербології Національного університету біоресурсів і природокористування за опублікованою методикою [4, 5]. Об'єктом для лабораторних досліджень слугувало насіння малорічних бур'янів плоскухи звичайної (*Echinochloa crus galli* L.), шириці загнutoї (*Amaranthus retroflexus* L.) та лободи білої (*Chenopodium album* L.). Для визначення зміни життєздатності насіння цих бур'янів під дією досліджуваних сполук його висівали по 50 штук у чашки Петрі на три шари фільтрувального паперу, змоченого 10 мл розчину цих речовин, і пророщували в термостаті протягом 30 діб при температурі 20-22 °С. Масова частка розчиненої речовини становила: 0,1 %, 0,01 % і 0,001 %. Контролем у дослідах було водне середовище.

Упродовж дослідного періоду кожні 5 діб проводили облік проростків, видаляючи їх із чашки. Через 30 діб насіння, яке залишилось непророслим, обробили індикатором життєздатності — 0,05 %-вим розчином хлорофенілтетразолію хлористого, витримуючи в ньому насіння протягом доби. Після цього його розглядали при 10-кратному збільшенні, роздавлюючи перед цим насіннєві оболонки. До мертвого відносили насіння зі згнилим під час досліду вмістом бурого кольору. Решту насіння з червоним і білим вмістом вважали відповідно в ендogenousму й екзогенному спокої.

Результати дослідження та їх обговорення. Було досліджені на гербістатну активність 20 нових речовин – арилсульфонілхлоробутенів та арилсульфоніларилхлоробутенів загальної формули $\text{ArSO}_2\text{CH}_2\text{-C(R)=CH-CH}_2\text{-Cl}$ (I) та $\text{ArSO}_2\text{CH=CH-CH(Cl)-CH}_2\text{-Ar}$ (II). Експериментальні дані гербістатної активності цих сполук наведені в