

УДК 502.3:504.5:629.33

© Н.Н. Беляев, Е.С. Славинская, Р.В. Кириченко

ПРОГНОЗ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА ВЫБРОСАМИ АВТОТРАНСПОРТА С УЧЕТОМ ХИМИЧЕСКИХ ТРАНСФОРМАЦИЙ ВЕЩЕСТВ И ПОГЛОЩЕНИЯ ПРИМЕСИ ПОВЕРХНОСТЬЮ ДОРОГИ

© M. Biliaiev, O. Slavinska, R. Kyrychenko

PREDICTION OF AIR POLLUTION IN CASE OF TRAFFIC EMISSIONS WITH ACCOUNT OF ADMIXTURE TRANSFER AND IT'S ABSORPTION BY ROAD

Цель. Целью работы является разработка эффективной численной модели, позволяющей выполнить прогноз уровня загрязнения атмосферного воздуха выбросами автотранспорта с учетом химических превращений загрязняющих веществ и их поглощения поверхностью автомагистрали, которая имеет специальное покрытие.

Методика исследований состоит в применении метода численного интегрирования дифференциальных уравнений, которые описывают рассеивание в атмосферном воздухе загрязняющих веществ, содержащихся в выбросах автотранспорта. Дифференциальные уравнения учитывают рассеивание загрязняющих веществ под действием ветрового потока, атмосферной турбулентной диффузии. Моделирующие уравнения дополняются обыкновенными дифференциальными уравнениями, которые учитывают химические превращения загрязняющих веществ. При моделировании учитывается деформация поля скорости воздушного потока, вызванная наличием автомобилей на автотрассе и наличием бордюра. При моделировании учитывается эффект поглощения загрязнителя поверхностью автотрассы за счет использования специального вещества. Для численного интегрирования моделирующих уравнений массопереноса используется неявная разностная схема расщепления. Задача аэродинамики по определению поля скорости воздушного потока решается на базе модели идеальной жидкости. Для численного интегрирования уравнения аэродинамики для потенциала скорости используется неявная разностная схема условной аппроксимации.

Результаты исследования. На основе разработанной численной модели создан специализированный пакет программ с помощью которого проведен вычислительный эксперимент по оценке формы зоны загрязнения возле автомагистрали. С помощью вычислительного эксперимента выполнена оценка эффективности применения специального покрытия, поглощающего NO из атмосферного воздуха.

Научная новизна. Предложена новая эффективная численная модель для оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха возле автомагистрали. Численная модель позволяет учитывать, при проведении вычислительного эксперимента, наличие автомобилей на автотрассе, интенсивность эмиссии загрязняющих веществ, атмосферную турбулентную диффузию, наличие бордюров, химическую трансформацию выбросов и поглощение загрязнителя покрытием автотрассы.

Практическое значение. Разработана 2D численная модель, позволяющая рассчитывать процесс загрязнения атмосферного воздуха выбросами автотранспорта с учетом химической трансформации вредных веществ и поглощения вредных веществ покрытием дороги.

Ключевые слова: загрязнение атмосферы, транспорт, химические преобразования

Вступление. В мире наблюдается устойчивая тенденция роста количества автомобилей. Это приводит к необходимости реконструкции существующих автомагистралей и строительству новых дорог. В то же время, автомобиль - один из основных источников загрязнения атмосферного воздуха в городах. Поэтому, данная тенденция приводит к росту уровня загрязнения окружающей среды, особенно вблизи автомагистралей.



Рис. 1. Эмиссия загрязняющих веществ от автотранспорта:
1 – сорбирующая поверхность

Прогноз уровня загрязнения окружающей среды вблизи автотрасс основывается на применении математических моделей. В настоящее время имеет место определенный дефицит моделей. В этой, связи возникает необходимость разработки эффективных методов оценки влияния автотранспорта на загрязнение окружающей среды при изменении структуры транспортной системы и увеличении интенсивности дорожного движения [1, 2, 9, 10].

Целью данной работы является создание 2D CFD модели для прогноза уровня загрязнения атмосферного воздуха возле автомагистрали с учетом химической трансформации выбросов и их поглощения поверхностью дороги, которая имеет специальное покрытие.

Постановка задачи. Рассматривается рассеивание выбросов от автотранспорта. Ставится задача разработки математической модели, позволяющей оценить эффективность применения специального покрытия дороги для уменьшения вредного воздействия выбросов на загрязнение атмосферного воздуха.

Модель трансформации и поглощения выбросов. Выбросы от автотранспорта содержат большое количество вредных веществ. В данной работе будем рассматривать выброс NOx от автомобилей. Под действием солнечного света процессы трансформации записываются так:



Следует подчеркнуть, что выбросы NOx представляют основной фактор при образовании смога.

Расчет химической трансформации указанных веществ осуществляется с использованием следующих зависимостей:

$$\frac{d[NO]}{dt} = -k_1[NO][O_3] + J[NO_2], \quad (4)$$

$$\frac{d[NO_2]}{dt} = k_1[NO][O_3] - J[NO_2], \quad (5)$$

$$\frac{d[O_3]}{dt} = -k_1[NO][O_3] + J[NO_2]. \quad (6)$$

Отметим, что выброс NO_2 составляет величину порядка 5 % от выброса NO_x , а остальная часть выброса – это NO . Для расчета процесса химической трансформации в работе принимается: $J = 0,0045s^{-1}$, $k_1 = 0,00039ppb^{-1}s^{-1}$.

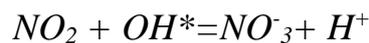
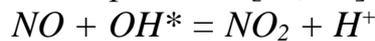
Рост динамики загрязнения атмосферного воздуха под воздействием автомобильных выбросов стимулировал активный поиск методов минимизации степени воздействия выбросов автомобилей на загрязнения окружающей среды. Одним из таких методов есть покрытие автомагистралей специальными веществами.

В данной работе будем рассматривать покрытие автомобильной дороги TiO_2 (рис.2).



Рис. 2. Применение специального покрытия, содержащего TiO_2 [12]

Известно, что под действием солнечного света такое покрытие поглощает NO [3]. При этом протекают такие реакции [11, 12] (рис.3).



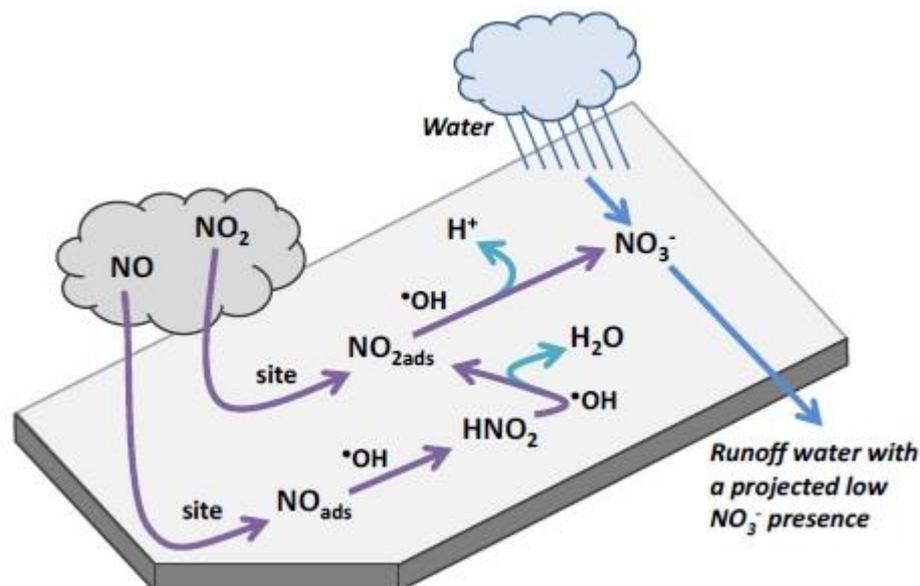


Рис. 3. Схема протекания химических реакций при использовании специального поглощающего покрытия [11]

Продукты реакции, при использовании данного покрытия, обычно смываются с поверхности дороги осадками. Следует отметить, что минимизация концентрации NO способствует снижению риска возникновения смога.

Модель массопереноса. Выбросы от автомобиля рассеиваются в атмосферном воздухе и формируют зону загрязнения возле автотрассы. Для расчета рассеивания рассматриваемых выше загрязняющих веществ используются следующие уравнения (профильная задача):

$$\frac{\partial[NO]}{\partial t} + \frac{\partial u[NO]}{\partial x} + \frac{\partial v[NO]}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial[NO]}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial[NO]}{\partial y} \right) + Q_{NO} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0), \quad (7)$$

$$\frac{\partial[NO_2]}{\partial t} + \frac{\partial u[NO_2]}{\partial x} + \frac{\partial v[NO_2]}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial[NO_2]}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial[NO_2]}{\partial y} \right) + Q_{NO_2} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0), \quad (8)$$

$$\frac{\partial[O_3]}{\partial t} + \frac{\partial u[O_3]}{\partial x} + \frac{\partial v[O_3]}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial[O_3]}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial[O_3]}{\partial y} \right). \quad (9)$$

где Q_{NO} – интенсивность выброса NO от автомобилей, Q_{NO_2} – интенсивность выброса NO_2 от автомобилей; u, v – компоненты вектора скорости ветра; $\mu = (\mu_x, \mu_y)$ – коэффициенты атмосферной турбулентной диффузии; x_0, y_0 –

координаты источника выброса вредного вещества; $\delta(x-x_0) \delta(y-y_0)$ – дельта-функция Дирака, с помощью которой моделируется место выброса вредного вещества.

Эмиссия загрязняющих веществ от автотранспорта моделируется серией точечных источников, заданной интенсивности Q_{NO} , Q_{NO_2} .

Ось Y направлена вертикально вверх. Постановка граничных и начальных условий для уравнения массопереноса рассмотрено в работах [1, 5, 7]. Однако отметим, что на поверхности, где применено TiO_2 покрытие (поверхность трассы) ставится граничное условие поглощения $C=0$.

На входе в расчетную область задаются следующие значения параметров [3, 4]:

$$u = u_1 \left(\frac{y}{y_1} \right)^p, \mu_y = k_1 \left(\frac{y}{y_1} \right)^m, \\ \mu_x = k_0 u,$$

где u_1 – скорость ветра на высоте y_1 (принимается $y_1 = 10 \text{ м}$); $k_1 = 0,2$; $k_0 = 0,1$; $p = 0,16$; $m \approx 1$.

Модель аэродинамики. Ветровой поток, встречая на своем пути автомобиля, деформируется. Поэтому возникает важная задача по расчету этого поля скорости, чтобы научно – обоснованно оценивать зоны загрязнения, которые формируются возле автотрасс. Поле скорости ветрового потока при обтекании автомобилей на дороге будем рассчитывать на базе модели потенциального течения [4, 7]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = 0, \quad (10)$$

где φ – потенциал скорости.

Компоненты вектора скорости воздушного потока определяется такими соотношениями:

$$u = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, v = \frac{\partial \varphi}{\partial y}. \quad (11)$$

Постановка краевых условий для уравнения (9) рассматривается в [7].

Для формирования вида расчетной области используются маркеры [1, 2, 7, 8]. С помощью маркеров в численной модели задается, положение автомагистрали, интенсивность выбросов от автомобилей и положение сорбирующей поверхности.

Метод решения. Для решения дифференциальных уравнений аэродинамики и массопереноса используются конечно-разностные методы. Для численного интегрирования уравнения для потенциала скорости применяется метод условной аппроксимации [6]. Для численного интегрирования уравнений (7) –

(9) используется попеременно-треугольная разностная схема [1, 7]. Построение этой разностной схемы осуществляется путем расщепления решения исходного уравнения массопереноса (7) – (9) на последовательность разностных уравнений более простой структуры, из которых неизвестное значение концентрации примеси определяется методом бегущего счета. Решение уравнений (4)-(6) проводится методом Эйлера [6].

Результаты. Для кодирования разностных уравнений разработанной численной модели использовался FORTRAN. Ниже представлены результаты решения задачи по оценке уровня загрязнения атмосферного воздуха вблизи автомагистрали, имеющей покрытие TiO_2 . Отметим, что расчетная область имеет сложную геометрическую форму: есть наличие автомобиля, бордюры по обеим сторонам трассы, сорбирующая поверхность (рис.1).

На рис. 4 представлено поле концентрации NO .

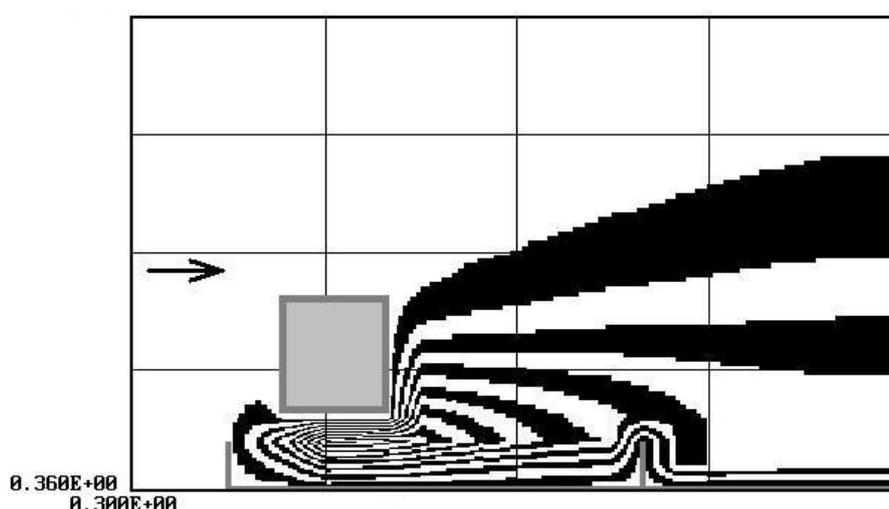


Рис. 4. Зона загрязнения возле автомагистрали

Как видно из рис.4, возле автомобиля сформировалась сложная по форме зона загрязнения. Деформация зоны загрязнения происходит в двух местах – под автомобилем, где находится выхлоп и возле стенки бордюра.

В табл.1 представлена масса адсорбированного загрязнителя на поверхности автотрассы.

Как видно из табл.1 с течением времени происходит рост количества адсорбированного загрязнителя. Использование специального покрытия для автотрассы можно рекомендовать на участках, где расположены светофоры и в течении определенного времени автомобили не двигаются, но выброс имеет место.

Отметим, что на решение задачи потребовалось около 8 сек компьютерного времени.

Таблиця 1.

Масса адсорбированного загрязнителя на поверхности автотрассы

| t, сек | Масса эмитированного загрязнителя | Масса адсорбированного загрязнителя |
|--------|---|---|
| 5 | 0,1 | 0,026 |
| 7 | 0,14 | 0,039 |
| 9 | 0,18 | 0,051 |
| 14 | 0,28 | 0,082 |

Выводы. Предложена эффективная численная модель для оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха выбросами от автотранспорта с учетом химической трансформации вредных веществ и поглощения их покрытием дороги. Предложенная модель дает возможность оперативно получить информацию об уровне загрязнения атмосферного воздуха.

Дальнейшее совершенствование моделей следует проводить в направлении создания численной модели, учитывающей образование вихрей в воздушном потоке.

Перечень ссылок

1. Беляев, Н.Н., Русакова, Т.И., Кириченко, П.С. (2014). *Моделирование загрязнения атмосферного воздуха выбросами автотранспорта на улицах городов*. Монография. – Д.: Акцент ПП.
2. Беляев, Н.Н., Русакова, Т.И. (2013). CFD прогнозирование процесса загрязнения воздушной среды на улицах. *Екологія і природокористування : зб. наук. пр. Ін-ту проблем природокористування та екології НАН України, 17*, 188-194.
3. Берлянд, М.Е. (1985). *Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы*. Ленинград: Гидрометеоиздат.
4. Бруяцкий, Е.В. (2000). *Теория атмосферной диффузии радиоактивных выбросов*. Киев: Ин-т гидромеханики НАН Украины.
5. Марчук, Г.И. (1982). *Математическое моделирование в проблеме окружающей среды*. Москва: Наука.
6. Самарский, А.А.(1983). *Теория разностных схем*. Москва: Наука.
7. Згуровский, М.З., Скопецкий, В.В., Хрущ, В.К., Беляев, Н.Н. (1997). *Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде*. Київ: Наукова думка.
8. Biliaiev M. (2011). Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography. *NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security*, 87-91. http://dx.doi.org/10.1007/978-94-007-1359-8_15
9. Overman H. (2009). Simulation model for NO_x distributions in a street canyon with air purifying pavement. *University Twente, Netherlands. Master thesis*, 69.

10. Trepte S., Schoenemeyer T. Calculation of concentration fields of air pollutants in street canyons with the microscale chemistry transport model MITRAS. <http://aix.meng.auth.gr/saturn/annualrep99/XSchoenemeyer.pdf>
11. Sikkema, J. (2013) Photocatalytic degradation of NO_x by concrete pavement containing TiO₂. *Graduate Theses and Dissertations. 13486, Iowa State University Digital Repository.*
12. Dylla, H. (2013). Quantification of the environmental impact of titanium dioxide photocatalytic pavements for air pollution remediation. *Louisiana State University. LSU Digital Commons. LSU Doctoral Dissertations.*

АНОТАЦІЯ

Мета. Метою роботи є розробка ефективної чисельної моделі, що дозволяє виконати прогноз рівня забруднення атмосферного повітря викидами автотранспорту з урахуванням хімічних перетворень забруднюючих речовин і їх поглинання поверхнею автомагістралі, яка має спеціальне покриття.

Методика досліджень полягає в застосуванні методу чисельного інтегрування диференціальних рівнянь, які описують розсіювання в атмосферному повітрі забруднюючих речовин, що містяться у викидах автотранспорту. Диференціальні рівняння враховують розсіювання забруднюючих речовин під дією вітрового потоку, атмосферної турбулентної дифузії. Моделюють рівняння доповнюються звичайними диференціальними рівняннями, які враховують хімічні перетворення забруднюючих речовин. При моделюванні враховується деформація поля швидкості повітряного потоку, викликана наявністю автомобілів на автотрасі і наявністю бордюру. При моделюванні враховується ефект поглинання забруднювача поверхнею автотраси за рахунок використання спеціальної речовини. Для чисельного інтегрування моделюючих рівнянь масопереносу використовується неявна різницева схема розщеплення. Задача аеродинаміки за визначенням поля швидкості повітряного потоку вирішується на базі моделі ідеальної рідини. Для чисельного інтегрування рівняння аеродинаміки для потенціалу швидкості використовується неявна різницева схема умовної апроксимації.

Результати дослідження. На основі розробленої чисельної моделі створений спеціалізований пакет програм за допомогою якого проведено обчислювальний експеримент по оцінці форми зони забруднення біля автомагістралі. За допомогою обчислювального експерименту виконана оцінка ефективності застосування спеціального покриття, що поглинає NO з атмосферного повітря.

Наукова новизна. Запропоновано нову ефективну чисельну модель для оцінки рівня забруднення атмосферного повітря біля автомагістралі. Чисельна модель дозволяє враховувати, при проведенні обчислювального експерименту, наявність автомобілів на автотрасі, інтенсивність емісії забруднюючих речовин, атмосферну турбулентну дифузію, наявність бордюрів, хімічну трансформацію викидів і поглинання забруднювача покриттям автотраси.

Практичне значення. Розроблена 2D чисельна модель, що дозволяє розраховувати процес забруднення атмосферного повітря викидами автотранспорту з урахуванням хімічної трансформації шкідливих речовин і поглинання шкідливих речовин покриттям дороги.

Ключові слова: забруднення атмосфери, транспорт, хімічні перетворення

ABSTRACT

Purpose. The purpose of the work is the development of an effective numerical model that allows to predict the level of atmospheric air pollution by vehicle emissions taking into account chemical transformations of pollutants and their absorption by the surface of a motorway that has a special coating.

Methodology. The research method consists in applying the method of numerical integration of differential equations that describe the dispersion of pollutants contained in the emissions of motor vehicles in the air. Differential equations take into account the dispersion of pollutants under the influence of wind flow, atmospheric turbulent diffusion. The modeling equations are supplemented by ordinary differential equations that take into account chemical transformations of pollutants. Modeling takes into account the deformation of the air velocity field caused by the presence of cars on the highway and the presence of a curb. At modeling the effect of absorption of a contaminant by a surface of a highway due to use of a special substance is considered. For the numerical integration of modeling mass transfer equations, an implicit difference splitting scheme is used. The problem of aerodynamics in determining the velocity field of the air flow is solved on the basis of the model of an ideal fluid. For numerical integration of the aerodynamic equation for the velocity potential, an implicit difference scheme of conditional approximation is used.

Results. On the basis of the developed numerical model, a specialized software package was created with the help of which a computational experiment was conducted to assess the shape of the pollution zone near the motorway. With the help of a computational experiment, the efficiency of using a special coating absorbing NO from atmospheric air was evaluated.

Scientific novelty. A new effective numerical model for estimating the level of atmospheric air pollution near the motorway is proposed. The numerical model allows taking into account, in the course of a computational experiment, the presence of cars on the highway, the intensity of emissions of pollutants, atmospheric turbulent diffusion, the presence of borders, the chemical transformation of emissions and the absorption of contaminants by road coverage.

Practical significance. 2D numerical model has been developed that allows to calculate the process of air pollution by motor vehicle emissions taking into account the chemical transformation of harmful substances and the absorption of harmful substances by covering the road.

Keywords: *atmosphere pollution, traffic, chemical transformations*