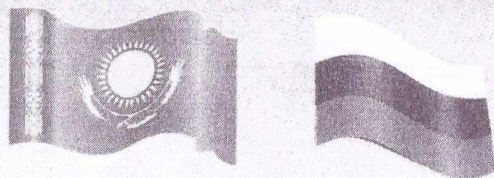


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН  
АТЫРАУСКИЙ ИНСТИТУТ НЕФТИ И ГАЗА  
НАЦИОНАЛЬНАЯ ИНЖЕНЕРНАЯ АКАДЕМИЯ РЕСПУБЛИКИ КАЗАХСТАН  
КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. аль-Фараби  
НИИ МАТЕМАТИКИ и МЕХАНИКИ КазНУ им. аль-Фараби  
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ СО РАН  
ИНСТИТУТ ГИДРОДИНАМИКИ им. М.А. Лаврентьева СО РАН



VIII КАЗАҚСТАН-РЕСЕЙ ХАЛЫҚАРАЛЫҚ  
ҒЫЛЫМИ-ПРАКТИКАЛЫҚ КОНФЕРЕНЦИЯСЫ

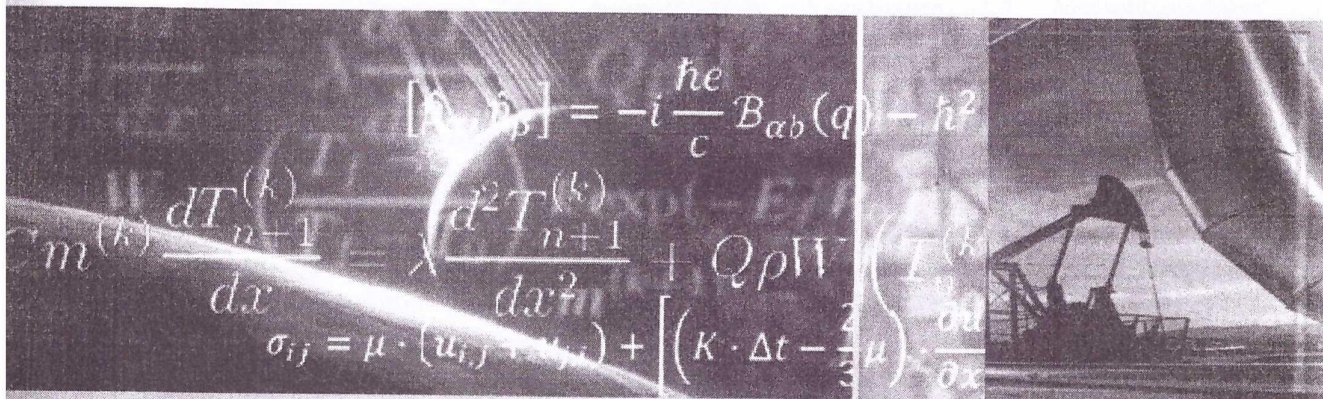
БАЯНДАМАЛАРЫНЫҢ ТЕЗИСТЕРІ

«МҮНАЙ-ГАЗ САЛАСЫНЫҢ ҒЫЛЫМИ-ТЕХНОЛОГИЯЛЫҚ  
ЖӘНЕ ЭКОЛОГИЯЛЫҚ МӘСЕЛЕЛЕРІНДЕГІ МАТЕМАТИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ»

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

VIII КАЗАХСТАНСКО-РОССИЙСКОЙ МЕЖДУНАРОДНОЙ  
НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

«МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В НАУЧНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ  
И ЭКОЛОГИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМАХ НЕФТЕГАЗОВОЙ ОТРАСЛИ»



Атырау, 2014 г.



распространения примесей в атмосфере с учетом фотохимических трансформаций. Вопросы моделирования процесса загрязнения атмосферного воздуха посвящены работы Марченко Г.И. [1-2], Пененко В.В.[3-4], Алояна А.Е.[5-7], Аргучинцева В.К. и Аргучинцевой А. В. [8].

#### Химическая модель

Для учета трансформации вредных примесей выделяемые от автотранспорта и промышленных предприятия при переносе используется методика предложенная в работе [7-8]. Для моделирования фотохимических процессов вредных веществ используются наиболее распространенные виды вредных веществ как CO, CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, SO<sub>3</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, HNO<sub>3</sub> и химические реакции между ними.

Для выбранных видов загрязняющих веществ построена схема превращения из одного вещества в другую под воздействием тепла и влаги в примеси. Каждое превращение имеет собственную константу скорости превращения. Химические превращения описываются системой дифференциальных уравнений. Приведем некоторые из них, например для монооксида углерода CO, и оксида азота NO.

$$\begin{aligned} \frac{d\varphi_{CO}}{dt} &= k_{60}\varphi_{CH_2O} - k_{65}\varphi_{CO} - k_{141}\varphi_{CO} + f_{CO} \\ \frac{d\varphi_{NO}}{dt} &= k_9\varphi_{NO_2} + k_{27}\varphi_{NO_2} + k_{36}\varphi_{NO_2} + k_{145}\varphi_{NO_2} + k_{34}\varphi_{NO_3} + k_{36}\varphi_{NO_3} - \\ &\quad - k_7\varphi_{NO} - k_{24}\varphi_{NO} - k_{26}\varphi_{NO} - k_{32}\varphi_{NO} - k_{51}\varphi_{NO} - k_{70}\varphi_{NO} - \\ &\quad - k_{72}\varphi_{NO} - k_{91}\varphi_{NO} - k_{117}\varphi_{NO} - k_{126}\varphi_{NO} - k_{130}\varphi_{NO} - k_{136}\varphi_{NO} + f_{NO} \end{aligned} \quad (2)$$

где  $k_m$  – константы скоростей соответствующих реакций. Данная схема была построена с учетом главных загрязняющих веществ выделенных в атмосферу от источников и химических превращений под воздействием солнца и других химических элементов которые имеются в атмосфере [8-9].

#### Математическая модель

Для изучения влияния антропогенных источников тепла, вредных веществ и неоднородности подстилающей поверхности в атмосферу промышленного города в трехмерной области  $\Omega$  рассматривается модель пограничного слоя атмосферы следующего вида.

Уравнение движения:

$$\begin{aligned} \frac{1}{Ho} \frac{\partial \bar{u}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} &= -\frac{Eu}{\rho} \frac{\partial \bar{\pi}}{\partial x} + \frac{1}{De} \bar{v} + \frac{1}{Re_T} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} \right) \right) \\ \frac{1}{Ho} \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} &= -\frac{Eu}{\rho} \frac{\partial \bar{\pi}}{\partial y} - \frac{1}{De} \bar{u} + \frac{1}{Re_T} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} \right) \right) \\ \frac{1}{Ho} \frac{\partial \bar{w}}{\partial t} + \left( \bar{u} \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) &= -\frac{Eu}{\rho} \frac{\partial \bar{\pi}}{\partial z} + \bar{\lambda} + \frac{1}{Re_T} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \bar{w}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \bar{w}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right) \right) \end{aligned}$$

уравнение теплопроводности:

$$\begin{aligned} \frac{1}{Ho} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial t} + \left( \bar{u} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) + \bar{S} \cdot \bar{w} + \bar{u} \left( \bar{S} \cdot \frac{\partial \bar{\delta}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} \right) + \bar{v} \left( \bar{S} \cdot \frac{\partial \bar{\delta}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} \right) &= \\ = \frac{1}{Re_T} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \bar{\theta}}{\partial z} \right) \right) \end{aligned}$$

для моделирования переноса и трансформации примесей используем уравнения следующего вида:

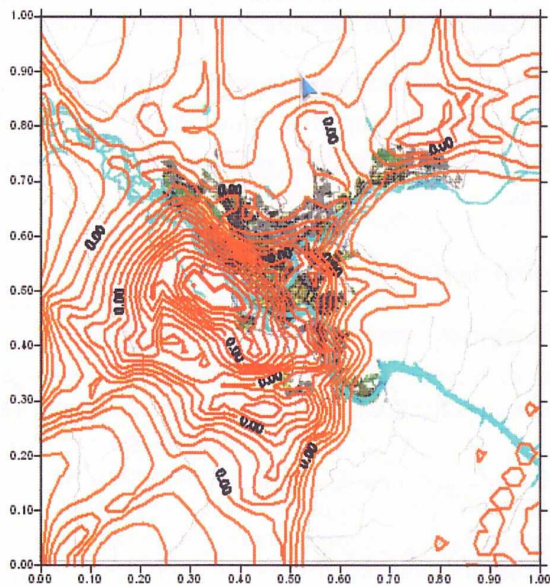
$$\frac{1}{Ho} \frac{\partial \bar{\varphi}_q}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{\varphi}_q}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{\varphi}_q}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{\varphi}_q}{\partial z} = \frac{1}{Re_T} \left( \frac{\partial}{\partial x} \left( k_x \frac{\partial \bar{\varphi}_q}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k_y \frac{\partial \bar{\varphi}_q}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k_z \frac{\partial \bar{\varphi}_q}{\partial z} \right) \right)$$



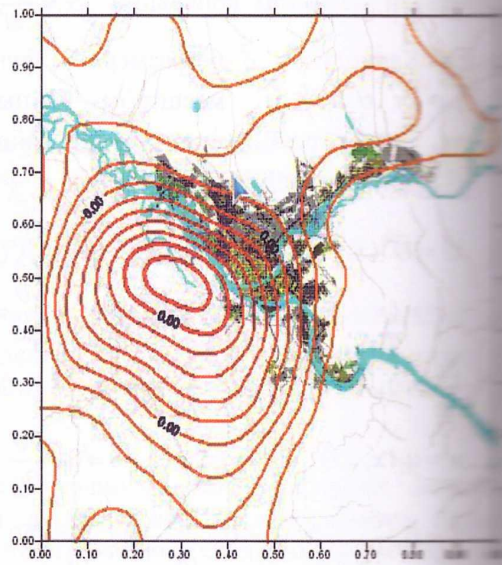
успешно используется при численном решении уравнений аэрогидродинамики и естественных переменных [10].

### Численные результаты

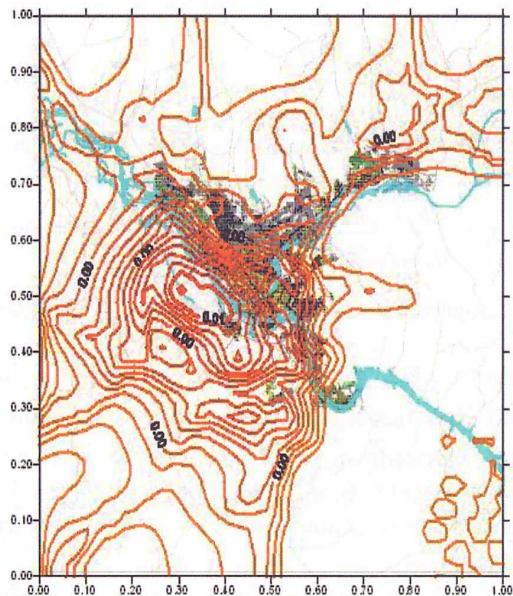
На базе вышеизложенной модели численно решена задача (3)-(8) для уравнений пограничного слоя атмосферы и переноса примесей с учетом фотохимической трансформации. В качестве численных результатов представлены распространения примесей от автотранспорта и промышленных предприятия при различных скоростях, и направлении ветра. Результаты получены при различных значениях определяющих течения таких как: безразмерное число турбулентного обмена  $Re_T$ , безразмерная характеристика отклонения ветра от геострофического  $De$ , и безразмерный параметр конвекции  $\bar{\lambda}$ . Результаты численных расчетов представлены с помощью графических редакторов Tecplot и Surfer.



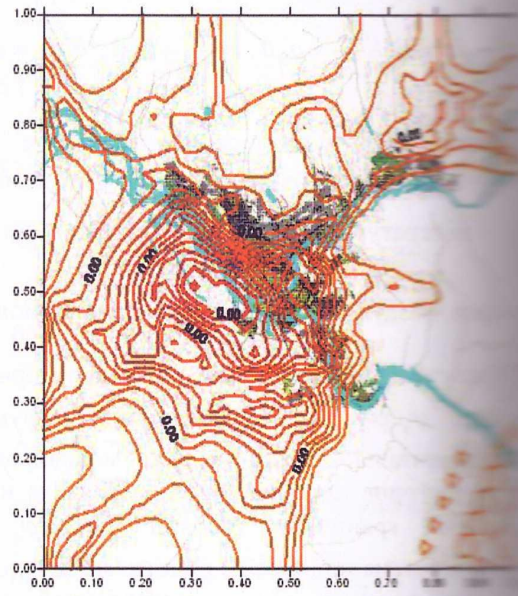
а) CaO



б) H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>



в) CO



г) CO<sub>2</sub>



Рисун  
предприя

Расчет  
материальн  
полученных  
РАИСПЭМ  
данными ве  
изображены  
источном н  
с некоторым  
Результ  
превращени  
определить т  
атмосфере по

1. Маг
2. Маг
3. Пен
4. Пен
5. Алоя
6. Алоя
7. Алоя

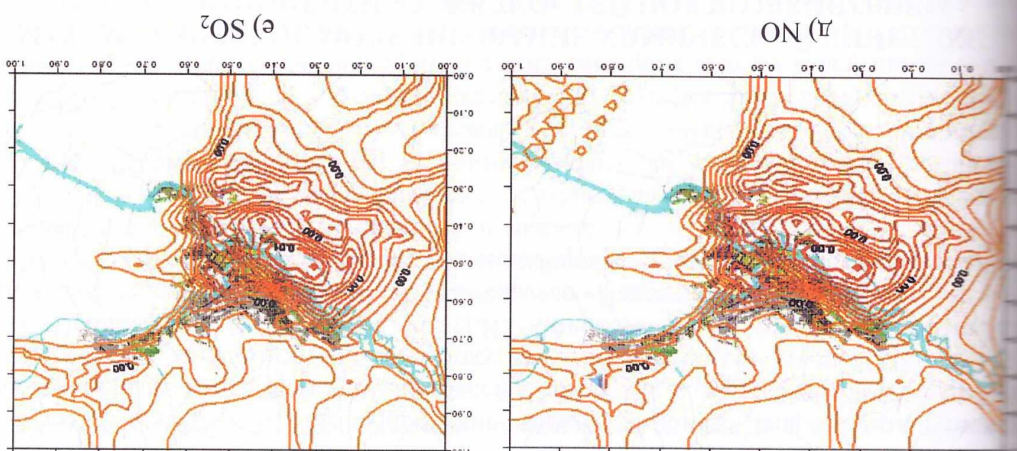
1. Марчук Г.И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. — М.: Наука, 1982 — 320 с.
2. Марчук Г.И., Алюян А.Е. Математическое моделирование региональных задач окружающей среды // Экологический вестник научных центров ЧЭС. -2004.-№1.-С.88-100.
3. Пененко В.В., Алюян А.Е. Модели и методы для задач охраны окружающей среды — М.: Наука, 1985 — 255 с.
4. Рененко В.В., Тsvetova E.A. Discrete-analytical methods for the implementation of mathematical models in environmental applications. Journal of Computational and Applied Mathematics, V.226, №2, 15 April 2009, p. 319-330.
5. Алюян А.Е. Моделирование динамики и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. Москва, Наука: 2008, 415 с.
6. Алюян А.Е., Numerical modeling of the interaction of gas species and aerosols in the atmospheric dispersive systems // Russ.J.Num. Analysis Math. Modeling.-2000.-Vol.15, No.3-4.-pp.211-224.
7. Алюян А.Е. Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере — М.: ИГиЛ РАН, 2002. -201 с.

### Литература

Расчеты проводились на сетках  $50 \times 50 \times 25$  и  $100 \times 100 \times 50$ . Значение вредных веществ в атмосфере от промышленных предприятий и автотранспорта задавались от результатов измерительных систем производственно-экологического мониторинга (РАСПЭМ). С помощью численных расчетов определены территории распространения вредных веществ при различных метеорологических условиях. Анализированы результаты, которые отражены на указанных выше рисунках, можно заключить следующее: При юго-восточном направлении ветра загрязнение атмосферного воздуха в городе будет ниже ПДК, некоторым превышением в северо-западной части.

Результаты показали, что предложены в данной работе описание фотохимических процессов в математической модели позволяет с удовлетворительной точностью определить территории сильно загрязненные вредными веществами за счет происходящих в атмосфере последовательных химических реакций при различных метеорологических

Рисунок 1 — Изолинии распространения загрязняющих веществ от промышленных предприятий и автотранспорта при юго-восточном направлении ветра со скоростью 7 м/с



8. Аргучинцев В.К. Моделирование мезомасштабных гидротермодинамических процессов и переноса антропогенных примесей в атмосфере и гидросфере региона оз. Байкал / В. К. Аргучинцев, А. В. Аргучинцева. – Иркутск: Изд-во Иркут.гос. ун-та, 2007. – 255 с.

9. Вернигорова В.Н., Макридин Н.И., Соколова Ю.А., Максимова И.Н. Химия загрязняющих веществ и экология -М.: Издательство «Палеотип», 2005. -240 с.

10. Белоцерковский О.М. Численное моделирование в механике сплошных сред.-М.: Физматлит, 1994.-448 с.ISBN 5-02-014986-1.

УДК 519.876.5

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ АКУСТИЧЕСКИХ ВИБРАЦИЙ

Б.Т.Жумагулов<sup>1)</sup>, Д.Б.Жакебаев<sup>1)</sup>, К.Д.Досумова<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> Казахский национальный университет им. аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан  
dauren.zhakebaev@kaznu.kz, swallow\_vip@mail.ru

This paper examines aspects of the chemical kinetics research of multicomponent fluids under the influence acoustic vibrations. Mathematical model, which describes the process of changes in the physicochemical properties of an incompressible Newtonian fluid is proposed. The numerical algorithm is developed and the results, which showing the change in concentration at high-and low-frequency effects are obtained.

### Введение

В последние годы расширяется область применения технологий, использующих акустические волны. Как правило, в промышленности применяют акустические колебания частотой около 15-20кГц и выше. Большое количество работ свидетельствуют о том, что высоко- и низкочастотные колебания способны полностью изменять агрегатное состояние некоторых веществ, изменять скорость диффузии, кристаллизации и растворение веществ, активизировать некоторые химические реакции. Воздействие такого рода на физико-химические процессы зачастую предоставляет уникальную возможность улучшить производительность труда, понизить энергозатраты, повысить качество готовой продукции, увеличить сроки хранения. При достаточной плотности такого воздействия происходит изменение физико-химических свойств исходной вязкой жидкости, в связи с чем, в настоящее время очень актуально создание устройств такого действия для многих отраслей промышленности.

Акустическое воздействие представляет собой волнообразно распространяющееся колебательное движение частиц среды и при распространении в газах, жидкостях и твердых телах ультразвук порождает уникальные явления, многие из которых нашли практическое применение в различных областях науки и техники.

Однако основным, наиболее важным физико-химическим и химическим эффектом, который возникает в жидкостях под действием акустических полей является кавитация [1,2].

Процесс кавитаций используются для обработки топлива, для снижения вязкости гидравлических жидкостей, при ультразвуковой очистке поверхностей, для гомогенизации во многих других устройствах. Имеется множество аналитических и экспериментальных исследований распространения звуковых волн в жидкости при кавитации. Математическое моделирование процесса кавитаций и исследование кавитационных пузырьков и течений была предметом многих исследований, подробнее о данных работах в публикациях [2-6].