

Механизм образования серной кислоты основан на взаимодействии, при котором серный ангидрид SO_3 поглощается водяным паром H_2O [4].



Считается, что реакция не является экзотермической. Процесс взаимодействия SO_3 и H_2O протекает практически мгновенно, и в совокупности с метеорологическими условиями определяет интенсивность выпадения продуктов окисления в зоне антропогенных источников.

Условиями образования серной кислоты приняты следующие критерии:

- 1) установление температуры дымовых газов ТЭС, содержащих водяной пар, состояния насыщения;
- 2) достижение текущей абсолютной влажности газов максимального значения при данной температуре [3, 4].

Выполнение этих условий обеспечивает образование серной кислоты в воздушном пространстве.

При разработке математической модели учитывались следующие процессы:

- 1) перенос газообразных продуктов сгорания ТЭС конвекцией и диффузией;
- 2) теплофизические и химические процессы, приводящие к изменению концентрации первичных антропогенных соединений и химического состава воздушного потока.

В работе используется математическая модель, описывающая изменение концентрации и температуры продуктов сгорания натуральных топлив ТЭС, и участки, на которых будет происходить образование серной кислоты в пограничном слое атмосферы.

Процесс переноса энергии, количества движения и массы в рассматриваемых условиях описывается системой нестационарных уравнений Навье-Стокса [5–7]. Считается, что температура и концентрация на источнике не зависят от времени. Для моделирования изменения абсолютной концентрации использованы нестационарные двумерные уравнения смешанной конвекции в приближении Буссинеска [6].

Безразмерные уравнения Навье-Стокса в приближении Буссинеска в переменных «вихрь скорости – функция тока – температура – концентрация» имеют следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \Omega}{\partial \tau} + U \frac{\partial \Omega}{\partial X} + V \frac{\partial \Omega}{\partial Y} &= \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Omega}{\partial Y^2} \right) + \frac{\text{Gr}}{\text{Re}^2} \frac{\partial \Theta}{\partial X}, \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial Y^2} &= \Omega, \\ \frac{\partial \Theta}{\partial \tau} + U \frac{\partial \Theta}{\partial X} + V \frac{\partial \Theta}{\partial Y} &= \frac{1}{\text{Pr Re}} \left(\frac{\partial^2 \Theta}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 \Theta}{\partial Y^2} \right), \\ \frac{\partial C_{\text{SO}_3}}{\partial \tau} + U \frac{\partial C_{\text{SO}_3}}{\partial X} + V \frac{\partial C_{\text{SO}_3}}{\partial Y} &= \frac{1}{\text{Pr Sc}} \left(\frac{\partial^2 C_{\text{SO}_3}}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_{\text{SO}_3}}{\partial Y^2} \right), \\ \frac{\partial C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial \tau} + U \frac{\partial C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial X} + V \frac{\partial C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial Y} &= \frac{1}{\text{Pr Sc}} \left(\frac{\partial^2 C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 C_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial Y^2} \right), \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

Граничные условия:

$$\begin{aligned}
X = 0, \quad 0 \leq Y \leq H_1, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial Y} = 1, \quad \Omega = 0, \quad \Theta = 0, \quad C = 0; \\
X = L_1, \quad 0 \leq Y \leq H_1, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial X} = 0, \quad \frac{\partial \Omega}{\partial X} = 0, \quad \frac{\partial \Theta}{\partial X} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial X} = 0; \\
X = L_2, \quad 0 \leq Y \leq H_{уст}, \quad \Psi = 0, \quad \Omega = 0, \quad \Theta = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial X} = 0; \\
X = L_3, \quad 0 \leq Y \leq H_{уст}, \quad \Psi = 0, \quad \Omega = 0, \quad \Theta = 0, \quad C = 0; \\
Y = 0, \quad 0 \leq X \leq L_3, \quad \Psi = 0, \quad \Omega = 0, \quad \Theta = 0, \quad C = 0; \\
Y = 0, \quad L_3 \leq X \leq L_1, \quad \Psi = 0, \quad \Omega = 0, \quad \Theta = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial X} = 0; \\
Y = H_{уст}, L_2 \leq X \leq L_3, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial X} = V_{газ}, \quad \Omega = 0, \quad \Theta = 1, \quad \frac{\partial C}{\partial X} = 1; \\
Y = H_1, \quad 0 \leq X \leq L_1, \quad \Psi = H_1, \quad \Omega = 0, \quad \Theta = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial Y} = 0.
\end{aligned} \tag{4}$$

Граничные условия для уравнения диффузии серного ангидрида и водяного пара идентичны.

Для решения задачи (1–4) использовался алгоритм, разработанный [9,10] для решения задач свободной и смешанной конвекции методом конечных разностей при записи системы уравнений в переменных «функция тока – вихрь». Разностные аналоги дифференциальных уравнений решены локально-одномерным методом [7]. Верификация метода расчета и алгоритма проведена по результатам решения аналогичных задач [11,12].

В качестве примера рассмотрен процесс образования серной кислоты в открытом воздушном пространстве протяженностью 10000 м и высотой 400 м. Источником загрязнения является устье газоотводящей трубы тепловой электрической станции. Теплофизические параметры дымовых газов на источнике считаются постоянными. Абсолютная концентрация водяного пара в атмосфере принималась равной 2000 мг/м³, серного ангидрида 0,04 мг/м³. Концентрация водяного пара на срезе газоотводящей трубы 3·10⁵ мг/м³, серного ангидрида 100 мг/м³. Температура наружного воздуха изменялась от 263 К до 297 К, Температура дымовых газов на срезе газоотводящей трубы принималась равной 413 К, скорость ветра 20 м/с. Типичные результаты численного моделирования приведены в таблице.

Таблица. Результаты численного исследования процесса образования серной кислоты

Параметр	Термический период			
	Весенний	Летний	Осенний	Зимний
Температура окружающей среды, К	284	297	280	263
Расстояние от источника загрязнения до области образования серной кислоты, м	1300	100...200	1350	1400
Протяженность области возможного выпадения осадков, м	1650	100...200	1800	1300
Концентрация серной кислоты в области возможного выпадения осадков, мг/м ³	3,0...1,5	3,0...0,04	2,5–1,5	2,5...0,04

Из анализа приведенных в таблице характеристик следует, что в различные термические периоды образование серной кислоты начинается на различных расстояниях от источника поступления SO₃. Так, например в летний период, при

температуре наружного воздуха 297 К микрокапли серной кислоты начинают образовываться на расстоянии 100...200 м от источника загрязнения. Абсолютная концентрация серной кислоты в осадках при этом достигает 3 мг/м³. В зимний период образование осадков, содержащих серную кислоту, начинается на расстоянии 1400 м от источника загрязнения, содержание серной кислоты на таком расстоянии может достигать 2,5 мг/м³. В осенний и весенний период образование серной кислоты начинается почти на одинаковых расстояниях. Протяженность области возможного выпадения осадков находится в диапазоне 1650...1800 м. Абсолютная концентрация серной кислоты в осадках при этом составляет 1,5...3 мг/м³.

Следует отметить, что полученные результаты иллюстрируют возможность пространственного моделирования координат участков территорий прилегающих к ТЭС, на которых возможно выпадение кислотных дождей в различные времена года. Для оценки площади участков возможного загрязнения достаточно информации о параметрах дымовых газов ТЭС и метеорологической обстановки в районе станции.

Проведено численное моделирование процесса образования серной кислоты в воздушном пространстве, прилегающем к тепловой электрической станции. Установлено, что протяженность участков, над которыми образуется серная кислота, зависит от времени года. Значение абсолютной концентрации серной кислоты при этом находится в диапазоне от 3 мг/м³ до 0,04 мг/м³.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. РД 34.02.305–98. Методика определения валовых выбросов загрязняющих веществ в атмосферу от котельных установок ТЭС. – М.: ВТИ, 1998. – 76с.
2. Внуков А.К. Защита атмосферы от выбросов энергообъектов: справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1992. – 176 с.
3. Заиков Г.Е., Маслов С.А., Рубайло В.Л. Кислотные дожди и окружающая среда. – М., Химия, 1991. – 144 с.
4. Израэль Ю.А., Назаров И.М., Прессман А.Я., Ровинский Ф.Я., Рябошапко А.Г.. Кислотные дожди. – Ленинград: Гидрометеиздат, 1989. – 270 с.
5. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир, 1980. – 616 с.
6. Пасконов В.М., Полежаев В.И., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. – М.: Наука, 1984.–288 с.
7. Берковский Б.М., Полевиков В.К. Вычислительный эксперимент в конвекции. – Минск.: Университетское, 1988.–167 с.
8. Самарский А.А., Попов Ю.П. Разностные схемы газовой динамики. – М.: Наука, 1975. – 424 с.
9. Kuznetsov G.V., Sheremet M.A. Conjugate natural convection with radiation in an enclosure. // International Journal of Heat and Mass transfer. – 2009. – Т. 52. - № 9–10. – P. 2215–2223.
10. Kuznetsov G.V., Sheremet M.A. Conjugate heat transfer in an enclosure under the condition of internal mass transfer and in the presence of the local heat source. // International Journal of Heat and Mass transfer. – 2009. – Т. 52. – № 1–2. – P. 1–8.
11. Кузнецов Г.В., Шеремет М.А. Двумерная задача естественной конвекции в прямоугольной области при локальном нагреве и теплопроводных границах конечной толщины. Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. 2006. №6. с. 29–39.
12. Кузнецов Г.В., Шеремет М.А. Сопряженный теплоперенос в замкнутой области с локально сосредоточенным источником тепловыделения. Инженерно-физический журнал. 2006. Т. 79. №1. с. 5–6.