

массы иприта составляет 4,0—4,2, арсенита натрия достигает 5,0—30,2 в зависимости от вида растения.

Нами проведена также экспериментальная оценка возможности применения эйхорнии (водный гиацинт, *E. crassipes* из семейства понтедериевые) для очистки водных объектов, загрязненных мышьяксодержащими соединениями. На примере метаарсенита натрия установлено, что эйхорния снижает концентрацию мышьяка с 0,1—1 мг/дм³ до уровня ПДК (0,05 мг/дм³) в течение 2—3 сут. Для растворов с содержанием мышьяка 10 мг/дм³ длительность очистки возрастает до 10—12 сут. Эйхорния сохраняет «работоспособность» при концентрации мышьяка 35 мг/дм³. При этом значительно (до 30—40 сут) увеличивается продолжительность фиторемедиации водоема и заметно (в 1,3—1,4 раза по сравнению с контролем) уменьшается рост биомассы. Одно растение эйхорнии способно к накоплению до 8 мг мышьяка(III) на открытой площадке в условиях искусственного водоема.

Таким образом, можно говорить о ряде преимуществ, которые дает биологический способ очистки почвы, загрязненной продуктами деструкции ФОВ, иприта и люизита. С экономической точки зрения предлагаемый способ выгоднее альтернативных технологий, он не предполагает крупных единовременных капиталовложений, связанные с ним издержки могут быть распределены на несколько лет. Возможна санация обширных территорий, при этом нет необходимости в экскавации почвы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шевченко А.В. Проблемы уничтожения и утилизации ОМП. 2006, 1(2), с. 2.

2. Швецова-Шиловская Т.Н. Там же, с.20.
3. Гормай В.В., Шаповалов В.Н., Шантроха А.В. Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 1995, т. 39, № 2, с. 39.
4. Завьялова Н.В., Кротович И.Н., Мягких В.И., Холстов В.И. Федеральные и региональные проблемы уничтожения химического оружия. Информ. вып. № 2, М.:ВИНИТИ, 2000, с. 41.
5. Ашихмина Т.Я. Научно-методологические основы системы комплексного экологического мониторинга объектов хранения и уничтожения химического оружия. Киров: Вятка, 2001, 473 с.
6. Munro A. e. a. Environ. Health Perspect., 1996, v. 107, № 12, p. 933.
7. Савельева Е.И., Зенкевич И.Г., Кузнецова Т.А. Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 2002, т. 46, № 6, с. 89.
8. Щербаков А.А., Любунь Е.В., Кузнецов П.Е. Трансформация иприта в объектах окружающей среды. Саратов: Научная книга, 2002, 80 с.
9. Савин Ю.И., Вишенкова Е.М., Пасынкова Е.М. Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 1995, т. 39, № 4, с. 121.
10. Щербаков А.А., Любунь Е.В., Кузнецов П.Е., Костерин П.В. Трансформация люизита в объектах окружающей среды. Саратов: Научная книга, 2002, 80 с.
11. Щербаков А.А., Шантроха А.В., Демидов О.М., Иванов К.Н. Тр. института СВИ РХБЗ, 2002, ч. II, с. 84.
12. Перминова И.В. Автореф. дисс.х.н. М., МГУ, 2000, 50 с.
13. Франке З. Химия отравляющих веществ. Т. 1. М.: Химия, 1973, с.276.
14. Скоробогатова В.И., Мандыч В.Г., Щербаков А.А. Поволжский экологический журнал, 2005, спец. вып., с. 30.
15. Скоробогатова В.И., Мандыч В.Г., Щербаков А.А. Мат. Всерос. конф. «Молекулярные механизмы взаимодействия микроорганизмов и растений». Саратов, 2005, с. 44.
16. Патент РФ № 2185901, 2002, МКИ В 09 С 1/00.

УДК 623.459.004.74

Моделирование переноса токсичных веществ в водных объектах

А. Г. Скоробогатов, М. В. Ферезанова, В. Г. Мандыч, А. А. Щербаков

Саратовский военный институт радиационной, химической и биологической защиты

В связи с проводимыми работами по уничтожению химического оружия особую актуальность приобретает проблема выявления закономерностей переноса опасных веществ, реализуемая путем моделирования динамики распространения загрязнителей. Найденные закономерности важны для прогноза развития последствий и служат основой для разработки мероприятий в планах действий для принятия решений при возникновении чрезвычайных ситуаций.

С точки зрения возможности заражения водных объектов чрезвычайную опасность представляет люизит в силу токсичности продуктов его разложения, способности к накоплению и т.д. [1]. Поэтому для организации и проведения работ в зонах защитных мероприятий, а также для прогнозирования последствий возможных чрезвычайных ситуаций важное значение имеет информация о поведении люизита в природных средах [2].

Основной компонент технического люизита — α -люизит (β -хлорвинилдихлорарсин). Особенности строения этого соединения (подвижные атомы хлора, трехвалентный мышьяк, непрочная мышьяк-углеродная связь и кратная связь С=С) обуславливают его сравнительно высокую реакционную способность [3, 4]. α -Люизит легко гидролизуется уже во влажном воздухе, образуя β -хлорвиниларсиноксид и β -хлорвиниларсоновую (β -хлорвинилмышьяковую) кислоту. Возможна дальнейшая трансформация люизита в неорганические соединения мышьяка. Продукты трансформации люизита являются высокотоксичными соединениями, способными сохраняться в водных системах значительно дольше, чем исходное соединение [3], и на длительное время заражать водоисточники.

Для описания процессов распространения соединений мышьяка в природной среде широкое распространение получили так называемые многосредные

камерные модели [5]. Камерные модели являются простейшими зависимостями, позволяющими прогнозировать распространение мышьяка в окружающей среде и динамику изменения его концентрации. Для создания этих моделей требуется минимальная информация о природных условиях региона и свойствах переносимых соединений. При построении таких моделей предполагается, что массоперенос мышьяка в природных средах осуществляется главным образом путем его миграции с почвенными растворами и водными потоками, а перенос из почвы и водных сред в атмосферу является несущественным. Модель позволяет учитывать процессы диффузионного переноса вещества и сорбционные явления.

Для прогноза химической обстановки в случае возможных аварий на объектах по хранению и уничтожению химического оружия применяют математические модели, описывающие перенос токсикантов не только в локальном, но и региональном масштабе [5, 6], при этом уровень воздействия выбросов загрязняющего вещества оценивается по его максимальной приземной концентрации.

Процессы переноса люизита в атмосфере применительно к условиям функционирования объекта по хранению химического оружия в г. Камбарке (Удмуртская Республика) подробно рассмотрены в статье [6]. На примере различных сценариев аварий показано, что серьезные последствия могут возникнуть, если авария сочетается с большим пожаром или сильным взрывом. При этом может произойти выброс и перенос на большие расстояния значительных количеств токсичных компонентов.

В связи с этим представляется целесообразной разработка модели распространения неконсервативных примесей, в частности продуктов природной и антропогенной трансформации люизита в проточных водоемах. Моделирование гидродинамики рек имеет свои особенности и трудности главным образом в описании переноса взвешенных частиц и неконсервативных примесей [7–9].

Ниже описывается разработанная нами модель, позволяющая рассчитывать скорость перемещения токсичного вещества и размеры области загрязнения в пресноводном проточном водоеме с учетом различных физических процессов. Эта модель интегрирует совокупность теоретических и эмпирических данных о рассматриваемых процессах и позволяет проследить их динамику с высоким пространственно-временным разрешением. Модель разработана применительно к объекту в г. Камбарке и позволяет проводить прогноз относительно степени и глубины заражения р. Камбарки в случае аварийной ситуации на военно-промышленном объекте.

Оценка транзитной и вихревой компонент скорости распространения области мышьяксоодержащего загрязнителя проводится по следующему алгоритму [10, 11].

1. Рассматриваемую часть акватории р. Камбарки разбивают на области, в которых преимущественно реализуется транзитный или макроциклический перенос вещества.

2. Соответственно принятому распределению глубин реки проводят основные линии потока, примерно

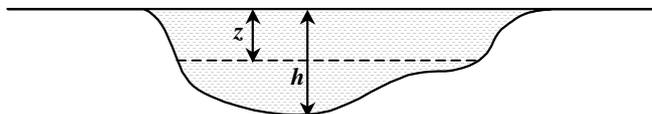
задающие направления движения воды, обусловленные как тем, так и другим видом переноса.

3. Для определения среднего модуля скорости транзитной компоненты в характерных створах (места, выбранные для измерений) проводят вертикальные сечения, ортогональные линиям потока этих стоковых течений. Среднее по сечению значение транзитной скорости рассчитывают как отношение текущего расхода воды Q к площади соответствующего сечения S .

4. Распределение суммарного потока по створу аппроксимируют выражением:

$$Q(h) = (ah + \bar{v}_1(h))h \quad (1)$$

где \bar{v}_1 — модуль средней по вертикали скорости течения воды, м/с; h — средняя глубина участка реки, для которого проводится расчет, м; a — константа, определяемая из условия нормирования распределенного потока на суммарный.



Соотношение глубин h и z

5. Распределение стоковой скорости по вертикали для периода «открытой» воды аппроксимируют параболическим законом:

$$v_1 = b\sqrt{(h-z)} + \frac{1}{2} \bar{v}_1 \quad (2)$$

где z — расстояние от поверхности водоема до горизонтали, для которой производится расчет, м (для различных загрязняющих веществ рассчитываются собственные значения v_1 , исходя из характерных значений z , например, для нефтепродуктов $z = 0$, для люизита и продуктов его трансформации z изменяется от h (начало загрязнения) до 0 (полное растворение загрязнителя) (см. рисунок); b — константа, определяемая из балансового соотношения:

$$b \int_0^h \sqrt{(h-z)} dz = Q(h) \quad (3)$$

6. Принимают, что значения модулей средней по вертикали скорости макроциклических компонент совпадают с транзитными компонентами на границах соприкосновения соответствующих областей. Кроме того, их приравнивают нулю в заданном центре вихря. Распределение средней по вертикали скорости вихревого потока по радиусу вихря для различных загрязнителей аппроксимируют выражением:

$$\bar{v}_2 = c[1 + d(h - \bar{h})]r \quad (4)$$

где c и d — константы, которые находят из условий инвариантности вихревого потока Q_v через любое радиальное сечение и условия инвариантности момента количества движения M этого потока относительно центра вихря:

$$\int_0^R \bar{v}_2 h dr = Q_v = \text{const}l(\alpha)$$

$$\int_0^R \bar{v}_2 h r dr = M = \text{const} 2(\alpha) \quad (5)$$

где α — угол поворота радиуса вихря относительно его центра; r — радиус вихря, м.

Значения инвариантов в правой части уравнений (5) находят из условия объединения вихревой и транзитной компонент в точке их касания. Распределение по вертикали вихревой компоненты скорости определяют по тем же правилам, что и в случае распределения транзитной компоненты.

7. После того, как средние по вертикали значения транзитной и вихревой компонент с учетом перечисленных гидродинамических условий заданы на линиях соответствующих сечений, поле скорости интерполируют на регулярную сетку принятой расчетной схемы.

Поступающие в водные объекты неконсервативные загрязняющие вещества подвергаются химическим превращениям, приводящим либо к уменьшению их концентрации в воде, либо к снижению степени токсичности. Трансформацию химических веществ необходимо учитывать при составлении материального баланса веществ в зоне загрязнения и их воздействия.

Так, в ряде методов непосредственно в расчетные формулы вводятся члены, отражающие разложение токсичного вещества, [11]. Другой подход предполагает особый прием учета неконсервативности вещества при расчете поля концентрации. Сначала, пренебрегая неконсервативностью вещества, выполняют расчет распределения концентрации вещества в водоеме (расчет разбавления) одним из методов, предложенных для консервативной примеси. Затем исправляют полученное распределение концентрации, используя соотношение, которое учитывает закономерность распада или трансформацию данного вещества. Раздельный расчет диффузии и превращения веществ позволяет учитывать процесс трансформации, протекающей по любой закономерности.

Ниже рассматривается простейший случай возможности использования формулы, приближенно описывающей трансформацию вещества в реакциях первого порядка:

$$S_n = S_0 \cdot e^{kdt} \quad (6)$$

где S_n — концентрация вещества в заданной точке расчетного створа или средняя концентрация в этом створе в момент времени t ; S_0 — концентрация вещества в начальном створе в начальный момент времени ($t = 0$); kd — коэффициент неконсервативности вещества (в c^{-1}) (при распаде $kd < 0$); t — время (в с), вычисляется как время добегающего вещества от некоторого начального створа загрязненных вод до расчетного створа.

Для случая заражения дистрофных, олиготрофных и эвтрофных водоемов люизитом нами установлены коэффициенты неконсервативности метаарсенита натрия, β -хлорвиниларсиноксида и β -хлорвинилмышьяковой кислоты (см. таблицу). Достоверность аппроксимации составляет 0,92—0,98.

Нетрудно получить выражение для расчета снижения концентрации за счет неконсервативности веще-

Коэффициенты неконсервативности продуктов гидролиза люизита

Тип водоема	Коэффициент неконсервативности, c^{-1}		
	метаарсенит натрия	β -хлорвиниларсиноксид	β -хлорвинилмышьяковая кислота
Дистрофный	0,0182	0,0097	0,0114
Олиготрофный	0,0315	0,0164	0,0217
Эвтрофный	0,0731	0,0368	0,0471

ства δS_{nc} на пути его перемещения от створа выпуска до расчетного створа:

$$\delta S_{nc} = S_0(1 - e^{kdt}) \quad (7)$$

где δS_{nc} — снижение концентрации в данном створе за время t ; S_0 — концентрация примеси в расчетном створе, получаемая в результате расчета разбавления без учета неконсервативности вещества.

Для оценки осаждения взвешенными частицами продуктов природной и антропогенной трансформации люизита была определена адсорбционная способность ила, составляющая относительно метаарсенита натрия, β -хлорвиниларсиноксида и β -хлорвинилмышьяковой кислоты 0,017±0,003, 0,013±0,003 и 0,016±0,003 мкг/г ила, соответственно.

С учетом всех вышеприведенных данных нами разработаны модель и программное обеспечение для прогноза распространения мышьяксодержащих соединений в водных объектах, учитывающие параметры неконсервативности загрязнителей и сорбционную способность ила. Применение разработанного программного обеспечения позволяет значительно сократить число отбираемых из водных объектов проб в случае возможных аварий на объектах по хранению и уничтожению химического оружия, а также при транспортировке «сухих» мышьяксодержащих солей. По данной модели осуществлен прогноз развития последствий в случае полного разрушения одного здания хранилища, в котором находятся 16 емкостей, с выбросом 560 кг люизита в результате взрыва на объекте по хранению химического оружия в г. Камбарке [6]. Показано, что спустя 20 часов после аварии концентрация загрязнителя превышает предельно допустимую на территории ближе отметки 12300 м от места оседания облака люизита на Камбарский пруд. В случае железнодорожной аварии на переезде через р. Камбарку с попаданием 300 кг «сухих» мышьяксодержащих солей спустя 10 часов содержание токсичных компонентов выше предельно допустимого уровня будет регистрироваться на расстоянии менее 6200 м от места сброса.

Предложенная методика может быть использована для экологического прогноза последствий возможных аварий в районах хранения и уничтожения химического оружия, для анализа возникшей обстановки, что необходимо для обеспечения оперативного руководства силами и средствами чрезвычайного реагирования.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аишхмина Т.Я. Научно-методологические основы системы комплексного экологического мониторинга объектов хра-

- нения и уничтожения химического оружия. Киров: Вятка, 2001, 473 с.
2. *Савин Ю.И., Вишенкова Е.М., Пасынкова Е.М.* Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 1995, т. 39, № 4, с. 121.
 3. *Щербаков А.А., Любунь Е.В., Кузнецов П.Е. и др.* Трансформация люизита в объектах окружающей среды. Саратов: Научная книга, 2002, 80 с.
 4. *Александров В.Н., Емельянов В.И.* Отравляющие вещества. М.: Воениздат, 1990, 271 с.
 5. *Горский В.Г., Моткин Г.А., Петрунин В.А. и др.* Научно-методические аспекты анализа аварийного риска. М.: Экономика и информатика, 2002, 260 с.
 6. *Карлссон Э., Конберг М., Руни П., Винтер С.* Рос. хим. ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 1995, т. 39, № 4, с. 79–87.
 7. *Менишуткин В.В.* Имитационное моделирование водных экологических систем. С.-Петербург: Наука, 1993, 158 с.
 8. *Великанов М.А.* Руслевой процесс (основы теории). М.: Госизд. ф.-м. лит., 1958, 396 с.
 9. *Харбух Дж., Бонем-Картер Г.* Моделирование на ЭВМ в геологии. М.: Мир, 1974, 320 с.
 10. *Щербаков А.А., Мандыч В.Г., Скоробогатов А.Г. и др.* Доклады Академии военных наук, 2005, № 4 (16), с. 77.
 11. *Скоробогатов А.Г., Игнатов А.В., Щербаков А.А.* Тез. докл. II научно-практ. конф. «Научно-технические аспекты обеспечения безопасности при уничтожении, хранении и транспортировке химического оружия». Москва, 2004, с. 124.