

УДК 627.324.2/3:532.72

Остапчук О. П., ст. викл., Ющук М. О., ст. 4 курсу ФПМ і КІС (Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне)

МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЕРТИКАЛЬНОЇ МІГРАЦІЇ РАДІОНУКЛІДІВ В ҐРУНТОВОМУ МАСИВІ В НЕІЗОТЕРМІЧНИХ УМОВАХ

Проведено дослідження розподілу концентрації радіонуклідів в неізотермічних умовах по області фільтрації з часом, що дасть можливість зробити прогноз щодо ступеня забруднення ґрунтів та їх подальшого очищення і використання.

Проведено исследование распределения концентрации радионуклидов в неізотермических условиях по области фильтрации со временем, что даст возможность сделать прогноз относительно степени загрязнения почв и их последующей очистки и использования.

A study of concentration distribution of radionuclides in unisothermal filtering conditions in the region over time, which will give the opportunity to forecast the degree of soil pollution and their subsequent purification and use.

Внаслідок чорнобильської катастрофи сильного радіонуклідного забруднення зазнала значна частина Волинського і Житомирського Полісся. Специфічні природні умови регіону сприяють посиленій міграції радіонуклідів з ґрунту в рослини та по трофічних ланцюгах далі в організм людини. Як наслідок, навіть через 24 роки з моменту аварії тут спостерігаються високі рівні забруднення ґрунтів і продуктів харчування. У зв'язку з цим екологічна оцінка забруднених радіонуклідами територій, виявлення найбільш небезпечних ділянок, вивчення закономірностей зниження з часом рівнів забрудненості різних угідь від радіонуклідів є дуже актуальними питаннями.

Розглядається задача вертикальної міграції радіонуклідів (наприклад ^{90}Sr (стронцій-90) або ^{137}Cs (цезій-137)) в ґрунтовому масиві великої протяжності в неізотермічних шляхом переносу їх фільтраційним потоком зі швидкістю \vec{V} та під впливом конвективної дифузії.

На глибині l в ґрунті (рис. 1) розміщений фільтр-вловлювач. Відомі п'єзометричні напори на верхній та нижній (підстилаючій) поверхнях ґрунту відповідно H_1 та H_2 ($H_1 > H_2$). Також відомий розподіл концентрацій радіонуклідів (мігранту) в початковий момент часу $t = 0$: $\tilde{C}_1^0(x)$ (для частинок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині) та $\tilde{C}_2^0(x)$

(для частинок, що знаходяться у воді, що зв'язана зі скелетом ґрунту).

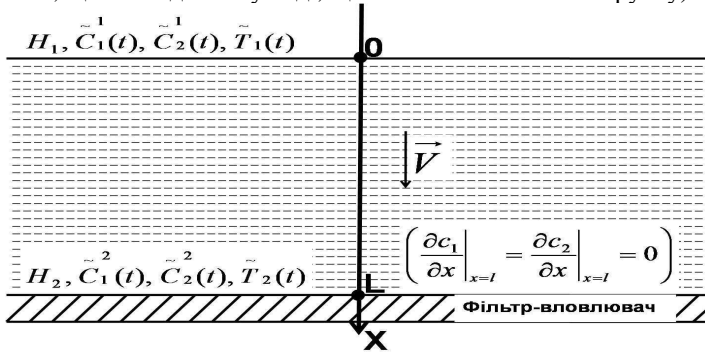


Рис. 1. Вертикальна міграція радіонуклідів в горизонтальному шарі ґрунту

На поверхні ґрунту відомі концентрації $\tilde{C}_1^1(t)$ та $\tilde{C}_2^1(t)$, а на фільтрі-вловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(t)$, $\tilde{C}_2^2(t)$ або умова швидкого поглинання радіонуклідів фільтром: $\frac{\partial c_1(l, t)}{\partial x} = \frac{\partial c_2(l, t)}{\partial x} = 0$. Також присутній процес теплопереносу, в якому задається температура в початковий момент часу $T_0(x)$ за лінійним законом. На поверхні ґрунту відома температура $T_1(x)$, а на фільтрі-вловлювачі температура $T_2(x)$.

Потрібно дослідити розподіл концентрацій $c_1(x, t)$, $c_2(x, t)$ радіонуклідів по області фільтрації з часом, що дасть можливість зробити прогноз щодо ступеня забруднення ґрунтів та їх подальшого очищення і використання.

Розглянемо математичну модель (1-10), в якій міграція радіонуклідів розглядається в неізотермічних умовах на фоні фільтрації чистої води (коефіцієнт фільтрації $k = const$):

$$D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - V \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2 + D_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \sigma \frac{\partial c_1}{\partial t}, \quad (1)$$

$$D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 + D_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \sigma \frac{\partial c_2}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - V c_p \frac{\partial T}{\partial x} = c_n \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (3)$$

$$V = -k \frac{\partial h}{\partial x} + \mu \frac{\partial T}{\partial x}, \quad \frac{\partial V}{\partial x} = 0, \quad (4)$$

$$c_1(x,0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x,0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad (5)$$

$$T(x,0) = \tilde{T}_0(x), \quad x \in (0, l), \quad (6)$$

$$h|_{x=0} = H_1, \quad h|_{x=l} = H_2, \quad (7)$$

$$c_1(0,t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad c_2(0,t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad 0 < t < t_1, \quad (8)$$

$$l_2 c_1(l,t) = \begin{cases} \tilde{C}_1^2(t), \\ \frac{\partial c_1(l,t)}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad l_2 c_2(l,t) = \begin{cases} \tilde{C}_2^2(t), \\ \frac{\partial c_2(l,t)}{\partial x} = 0, \end{cases} \quad (9)$$

$$T(0,t) = \tilde{T}_1(t), \quad T(l,t) = \tilde{T}_2(t). \quad (10)$$

Для отримання чисельного розв'язку даної задачі поставимо їй у відповідність сукупність двох крайових задач:

$$\left\{ \begin{array}{l} D_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - V \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2 + D_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \sigma \frac{\partial c_1}{\partial t}, \\ c_1(x,0) = \tilde{C}_1^0(x), \\ c_1(0,t) = \tilde{C}_1^1(t), \\ l_2 c_1(l,t) = \begin{cases} \tilde{C}_1^2(t), \\ \frac{\partial c_1(l,t)}{\partial x} = 0. \end{cases} \end{array} \right. \quad (11)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} D_2 \frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 + D_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \sigma \frac{\partial c_2}{\partial t}, \\ c_2(x,0) = \tilde{C}_2^0(x), \\ c_2(0,t) = \tilde{C}_2^1(t), \\ l_2 c_2(l,t) = \begin{cases} \tilde{C}_2^2(t), \\ \frac{\partial c_2(l,t)}{\partial x} = 0. \end{cases} \end{array} \right. \quad (12)$$

Спочатку розв'яжемо задачу фільтрації (13), а потім задачу теплопереносу (14):

$$\begin{cases} V = -k \frac{\partial h}{\partial x} + \mu \frac{\partial T}{\partial x}, \\ \frac{\partial V}{\partial x} = 0, \\ h|_{x=0} = H_1, \\ h|_{x=l} = H_2. \end{cases} \quad (13)$$

$$\begin{cases} \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - V c_p \frac{\partial T}{\partial x} = c_n \frac{\partial T}{\partial t}, \\ T(x, 0) = \tilde{T}_0(x), \quad x \in (0, l), \\ T(0, t) = \tilde{T}_1(t), \\ T(l, t) = \tilde{T}_2(t). \end{cases} \quad (14)$$

Вводимо різницеву сітку $\omega_{h\tau} = \{x_i = ih, i = \overline{0, n}; t_k = k\tau, k = \overline{0, k_1}\}$ і побудуємо різницеві схеми для задач (11-14).

Апроксимуючи задачу фільтрації (13) отримаємо:

$$V_i = -k \frac{H_2(t) - H_1(t)}{l} + \mu \frac{T_{i+1}^k - T_{i-1}^k}{h}. \quad (15)$$

В результаті дискретизації задачі (14) отримаємо монотонну різницеву схему:

$$\chi_i \frac{T_{i-1}^{k+1} - 2T_i^{k+1} + T_{i+1}^{k+1}}{h^2} + r_+ \frac{T_{i+1}^{k+1} - T_i^{k+1}}{h} + r_- \frac{T_i^{k+1} - T_{i-1}^{k+1}}{h} = g \frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\tau}, \quad (16)$$

де

$$\chi_i = \frac{1}{1 + \frac{hV_i c_p}{2\lambda}} = \frac{\lambda}{\lambda + 0.5hV_i c_p},$$

$$r = \frac{-V_i c_p}{\lambda} = r_+ + r_-, \quad r_+ = \frac{1}{2}(r + |r|) \geq 0, \quad r_- = \frac{1}{2}(r - |r|) \leq 0, \quad g = \frac{c_n}{\lambda}.$$

Запишемо різницеву схему (16) в прогоночному вигляді:

$$\begin{aligned} a_i T_{i-1}^{k+1} - c_i T_i^{k+1} + b_i T_{i+1}^{k+1} &= -f_i^k, \\ T_i^0 = \tilde{T}_0^0, \quad T_0^{k+1} = \tilde{T}_1^{k+1}, \quad T_l^{k+1} = \tilde{T}_1^{k+1}, \end{aligned} \quad (17)$$

де

$$a_i = \frac{\chi_i}{h^2} - \frac{r_-}{h}, \quad b_i = \frac{\chi_i}{h^2} + \frac{r_+}{h}, \quad c_i = \frac{2\chi_i}{h^2} + \frac{r_+}{h} - \frac{r_-}{h} + \frac{g}{\tau}, \quad f_i^k = \frac{c_n}{\lambda\tau} T_i^k.$$

Чисельний розв'язок (17) знаходимо методом прогонки:

$$T_i^{k+1} = \alpha_{i+1} T_{i+1}^{k+1} + \beta_{i+1}, \quad (18)$$

де

$$\alpha_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - \alpha_i a_i}, \quad \beta_{i+1} = \frac{a_i \beta_i + f_i^k}{c_i - \alpha_i a_i}, \quad \alpha_1 = 0, \quad \beta_1 = \tilde{T}_1^{k+1}.$$

Крайову задачу (11) розв'яжемо з використанням монотонної різницевої схеми. В результаті дискретизації отримаємо:

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{C_{1,i-1}^{k+1} - 2C_{1,i}^{k+1} + C_{1,i+1}^{k+1}}{h^2} + r_+ \frac{C_{1,i+1}^{k+1} - C_{1,i}^{k+1}}{h} + r_- \frac{C_{1,i}^{k+1} - C_{1,i-1}^{k+1}}{h} - \\ - \frac{\gamma_1}{D_1} C_{1,i}^{k+1} + \frac{\gamma_2}{D_1} C_{2,i}^k + \frac{D_T}{D_1} \frac{T_{i-1}^{k+1} - 2T_i^{k+1} + T_{i+1}^{k+1}}{h^2} = \sigma' \frac{C_{1,i}^{k+1} - C_{1,i}^k}{\tau}, \quad (19) \end{aligned}$$

$$C_{1,i}^0 = \tilde{C}_{1,i}^0, \quad C_{1,0}^{k+1} = \tilde{C}_1^{1,k+1}, \quad C_{1,n}^{k+1} = \chi_1 C_{1,n-1}^{k+1} + \bar{\mu},$$

де $\chi_1 = 0$, $\bar{\mu}_1 = \tilde{C}_1^{2,k+1}$ – у випадку, коли диференційований оператор l_2 задає на фільтрі граничну умову 1-го роду, і $\chi_1 = 1$, $\bar{\mu}_1 = 0$ – у випадку задання граничної умови 2-го роду.

Тут наведені наступні позначення:

$$\mu_i = \frac{1}{1 + 0,5h_1 |r|} = \frac{1}{1 + \frac{h_1 V_i}{2D_1}}, \quad r = r_+ + r_-, \quad r = -\frac{V_i}{D_1}, \quad \sigma' = \frac{\sigma}{D_1},$$

$$r_+ = 0,5 \left(-\frac{V_i}{D_1} + \frac{V_i}{D_1} \right) \equiv 0, \quad r_- = 0,5 \left(-\frac{V_i}{D_1} - \frac{V_i}{D_1} \right) = -\frac{V_i}{D_1}.$$

Прогоночний вигляд наступний:

$$\begin{aligned} a_{1,i} C_{1,i-1}^{k+1} - \bar{c}_{1,i} C_{1,i}^{k+1} + b_{1,i} C_{1,i+1}^{k+1} = -f_{1,i}^k, \\ C_{1,i}^0 = \tilde{C}_{1,i}^0, \quad C_{1,0}^{k+1} = \tilde{C}_1^{1,k+1}, \quad C_{1,n}^{k+1} = \chi_1 C_{1,n-1}^{k+1} + \bar{\mu}, \quad (20) \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} a_{1,i} = \frac{\mu_i}{h^2} - \frac{r_-}{h}, \quad b_{1,i} = \frac{\mu_i}{h^2} + \frac{r_+}{h}, \quad \bar{c}_{1,i} = \frac{2\mu_i}{h^2} + \frac{r_+}{h} - \frac{r_-}{h} + \frac{\gamma_1}{D_1} + \frac{\sigma}{D_1\tau}, \\ f_{1,i}^k = \frac{\sigma}{D_1\tau} C_{1,i}^k + \frac{\gamma_2}{D_1} C_{2,i}^k + \frac{D_T}{D_1 h^2} (T_{i-1}^{k+1} - 2T_i^{k+1} + T_{i+1}^{k+1}). \end{aligned}$$

Чисельний розв'язок (20) знаходимо методом прогонки:

$$C_{1,i}^{k+1} = \alpha_{i+1}^1 C_{1,i+1}^{k+1} + \beta_{i+1}^1, \quad (21)$$

де

$$\alpha_{i+1}^1 = \frac{b_{1,i}}{\bar{c}_{1,i} - \alpha_i^1 a_{1,i}}, \quad \beta_{i+1}^1 = \frac{a_{1,i} \beta_i^1 + f_{1,i}^k}{\bar{c}_{1,i} - \alpha_i^1 a_{1,i}}, \quad \alpha_1^1 = 0, \quad \beta_1^1 = \tilde{C}_1^{1,k+1}.$$

Для задачі (12) використаємо неявну різницеву схему, яка має вигляд:

$$D_2 \frac{C_{2,i-1}^{k+1} - 2C_{2,i}^{k+1} + C_{2,i+1}^{k+1}}{h^2} + \gamma_1 C_{1,i}^{k+1} - \gamma_2 C_{2,i}^{k+1} + D_T \frac{T_{i-1}^{k+1} - 2T_i^{k+1} + T_{i+1}^{k+1}}{h^2} = \sigma \frac{C_{2,i}^{k+1} - C_{2,i}^k}{\tau}, \quad (22)$$

$$C_{2,i}^0 = \tilde{C}_{2,i}^0, \quad C_{2,0}^{k+1} = \tilde{C}_2^{1,k+1}, \quad C_{2,n}^{k+1} = \chi_2 \tilde{C}_{2,n-1}^{k+1} + \bar{\mu}_2,$$

де $\chi_2 = 0$, $\bar{\mu}_2 = \tilde{C}_2^{2,k+1}$ – у випадку задання граничної умови 1-го роду, і $\chi_2 = 1$, $\bar{\mu}_2 = 0$ – у випадку задання граничної умови 2-го роду.

Прогоночний вигляд (22) наступний:

$$a_{2,i} C_{2,i-1}^{k+1} - \bar{c}_{2,i} C_{2,i}^{k+1} + b_{2,i} C_{2,i+1}^{k+1} = -f_{2,i}^k, \quad (23)$$

$$C_{2,i}^0 = \tilde{C}_{2,i}^0, \quad C_{2,0}^{k+1} = \tilde{C}_2^{1,k+1}, \quad C_{2,n}^{k+1} = \chi_2 \tilde{C}_{2,n-1}^{k+1} + \bar{\mu}_2,$$

де

$$a_{2,i} = \frac{1}{h^2}, \quad b_{2,i} = \frac{1}{h^2}, \quad \bar{c}_{2,i} = \frac{2}{h^2} + \frac{\gamma_2}{D_2} + \frac{\sigma}{D_2 \tau},$$

$$f_{2,i}^k = \frac{\sigma}{D_2 \tau} C_{2,i}^k + \frac{\gamma_1}{D_2} C_{1,i}^{k+1} + \frac{D_T}{D_2 h^2} (T_{i-1}^{k+1} - 2T_i^{k+1} + T_{i+1}^{k+1}).$$

Аналогічно попередньому, розв'язок знаходимо методом прогонки:

$$C_{2,i}^{k+1} = \alpha_{i+1}^2 C_{2,i+1}^{k+1} + \beta_{i+1}^2, \quad (24)$$

де

$$\alpha_{i+1}^2 = \frac{b_{2,i}}{\bar{c}_{2,i} - \alpha_i^2 a_{2,i}}, \quad \beta_{i+1}^2 = \frac{a_{2,i} \beta_i^2 + f_{2,i}^k}{\bar{c}_{2,i} - \alpha_i^2 a_{2,i}}, \quad \alpha_1^2 = 0, \quad \beta_1^2 = \tilde{C}_2^{1,k+1}.$$

Програмна реалізація обчислювального алгоритму розв'язку задачі проведена в інтегрованому середовищі візуального програмування Delphi 7.0.

В якості конкретного прикладу спрогнозуємо зміну концентрації радіонуклідів через 10 років з такими вхідними даними:

$$l = 1.5 \text{ м}, \quad H_1 = 1 \text{ м}, \quad H_2 = 0 \text{ м}, \quad k = 0.005 \frac{\text{м}}{\text{доба}}, \quad \mu = 2.8 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{град} \cdot \text{доба}},$$

$$D_1 = 0.002 \frac{M^2}{\text{доба}}, D_2 = 0.001 \frac{M^2}{\text{доба}}, D_t = 0.002 \frac{кг \cdot M^2}{град \cdot \text{доба} \cdot л}, \sigma = 0.4,$$

$$\gamma_1 = \gamma_2 = 0.0065, \lambda = 1.08 \frac{кДж}{M \cdot град \cdot \text{доба}}, c_n = 2.137 \frac{кДж}{кг \cdot град},$$

$$c_p = 4.2 \frac{кДж}{кг \cdot град}, \tilde{C}_1^0 = \tilde{C}_2^0 = 0 \frac{кг}{M^3}.$$

На основі програмної реалізації було проведено ряд чисельних експериментів для розв'язання даної задачі з граничними умовами 1-го та

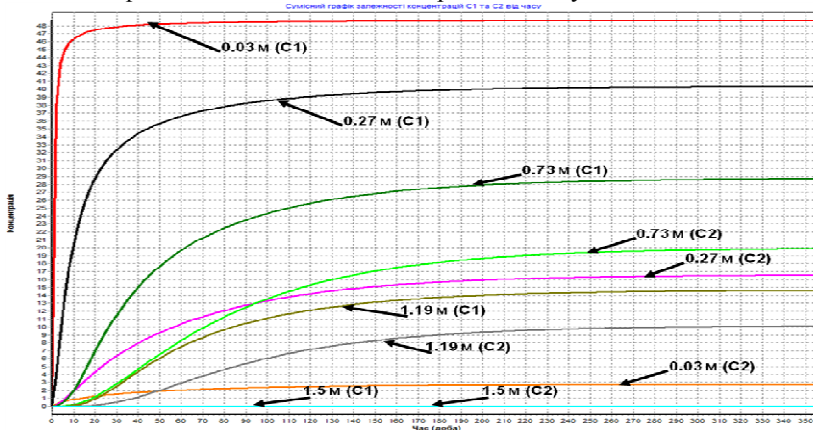


Рис. 2. Порівняльний графік розподілу концентрації C1 та C2 з часом для граничних умов 1-го роду

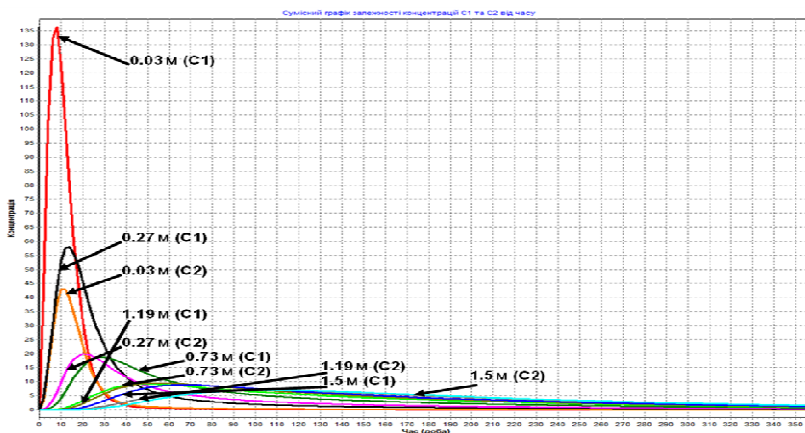


Рис. 3. Порівняльний графік розподілу концентрацій C1 і C2 з часом для граничних умов 2-го роду

Висновки

- Розподіл концентрацій з часом по глибині шару ґрунту суттєво відрізняється, а саме – концентрація ***C1*** зменшується значно швидше в порівнянні з концентрацією ***C2***;
- при математичному моделюванні процесу масопереносу речовин потрібно враховувати залежність параметрів фільтраційного потоку від його фізико-хімічних властивостей та властивостей пористого середовища, оскільки це суттєво впливає на масо перенос, зокрема при різних значеннях коефіцієнта фільтрації ***k***, швидкість фільтрації змінюється, а саме: при збільшенні швидкість зростає; при збільшенні пористості ґрунту концентрації ***C1*** і ***C2*** інтенсивніше перерозподіляються по області фільтрації; значення концентрацій ***C1*** та ***C2*** обернено-пропорційно залежить від коефіцієнтів масообміну;
- неізотермічні умови несуттєво впливають на процес міграції радіонуклідів в ґрунтовому масиві;
- родючий шар ґрунту практично очищується та стає придатним до використання приблизно через 2 роки.

1. Власюк А. П., Остапчук О. П. Числове моделювання однієї задачі про утилізацію радіонуклідів // Тез. доп. Міжнародної школи-семінару “Прогнозування та прийняття рішень в умовах невизначеності”, Мелітополь. – 2005. – С. 111-113. 2. Власюк А. П., Остапчук О. П. Числове моделювання міграції радіонуклідів при горизонтальній фільтрації підземних вод // Тез. доп. Міжнародної школи-семінару “Прогнозування та прийняття рішень в умовах невизначеності”, Східниця. – 2006. – С. 180-181. 3. Власюк А. П., Остапчук О. П. Математичне моделювання задачі про утилізацію радіонуклідів в шарі ґрунту // Тез. доп. Міжн. конф. ім. акад. М. Кравчука, Київ. – 2006. – С. 57. 4. Веригин Н. Н., Шержуков Б. С. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах // Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917-1967). – М. : Наука, 1969. – С. 237-313. 5. Сергиенко И. В., Скопецкий В. В., Дейнека В. С. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах. – Киев : Наук. думка, 1991. – 432 с. 6. Ляшко С. И. Оптимизация и математическое моделирование масопереноса подземных вод. – К. : Наук. думка, 1998. – 256 с. 7. Бурак Я. Й., Чапля Є. Я. Вихідні положення математичної моделі гетеродифузного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі // Доп. НАН України. – 1993. – № 10. – С. 59-63. 8. Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масо переносу / НАН України, центр матем. моделювання Ін-ту прикл. проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача. – Львів: СПОЛОМ, 2003. – 128 с. 9. Власюк А. П., Остапчук О. П. Чисельне дослідження одновимірної задачі масопереносу сольових розчинів у ґрунтових масивах // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. наук. – 2004. – Вип. 4 – С. 228-237. 10. Самарский А. А. Теория разностных схем. – 3-е изд. – М. : Наука, 1989. – 616 с.

Рецензент: к.т.н., доцент Калько А. Д. (НУВГП)