

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКОСИСТЕМ

УДК 621.311.25:536.24:519.6

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МИГРАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ В ПОЧВЕ

*д-р техн. наук, проф. С. П. КУНДАС, д-р физ.-мат. наук, доц. Н. Н. ГРИНЧИК, И. А. ГИШКЕЛЮК
(Международный государственный экологический университет им. А. Д. Сахарова, Минск)*

Предложена физико-математическая модель миграции примесей в почве с учетом конвективной диффузии, сорбции и неизотермического влагопереноса. С использованием разработанной модели проведено численное моделирование распространения радионуклидов с поверхности в глубину почвы.

Введение. В настоящее время в нашей стране большое внимание уделяется вопросам экологической безопасности и защите окружающей среды. Важнейшим элементом этой проблемы является загрязнение почвы различными химическими веществами, и прежде всего радионуклидами, вследствие аварии на Чернобыльской АЭС.

Одним из актуальных направлений решения этой проблемы является прогнозирование распространения радионуклидов в зонах загрязнений, что позволит заблаговременно принимать необходимые меры, обеспечивающие снижение поступления этих веществ в растениеводческую продукцию и предотвращение накопления их в организмах сельскохозяйственных животных [1].

Применение численного моделирования в этой области позволяет проводить исследования миграции примесей без применения дорогостоящих экспериментов и полевых измерений. Однако для решения этой задачи необходимо иметь математическую модель, описывающую миграцию примесей адекватно реальному процессу, существующему в природе. Анализ работ в этой области [2, 3] показывает, что в настоящее время отсутствует строгое математическое описание миграции примесей, которое учитывает механизмы неизотермического влагопереноса, конвективной диффузии и сорбции, без которых невозможно адекватно описать этот процесс. Решению этих актуальных задач и посвящена настоящая работа.

Математическая модель миграции радионуклидов в почве. При построении математической модели предполагается, что почва является изотропной, гомогенной пористой средой, а примеси представляют собой растворимую субстанцию, жидкая и твердая фаза которой находится в равновесии.

Миграция примесей в пористой среде осуществляется с помощью процессов дисперсии в движущемся потоке жидкости и диффузией адсорбированных примесей в скелете породы [3, 4].

Процесс распространения в пористой среде примесей, растворенных в воде с учетом радиоактивного распада, описывается конвективно-диффузионным уравнением вида

$$m \frac{\partial C}{\partial t} + mV_{lq} \nabla C = \nabla (mD_{lq} \nabla C) - \lambda mC - F, \quad (1)$$

где m – активная пористость скелета породы, $\text{м}^3/\text{м}^3$; C – концентрация радионуклида в жидкой фазе, $\text{кг}/\text{м}^3$; t – время, с; V_{lq} – скорость потока жидкости, $\text{м}/\text{с}$; D_{lq} – коэффициент дисперсии в жидкости, $\text{м}^2/\text{с}$; λ – постоянная распада радионуклида, $1/\text{с}$; F – количество сорбированной примеси в единицу времени, $\text{кг}/(\text{м}^3 \text{с})$.

Перенос в скелете породы адсорбированных примесей с учетом радиоактивного распада можно описать диффузионным уравнением вида

$$\rho_{sol} \frac{\partial N}{\partial t} = \nabla (\rho_{sol} D_{sol} \nabla N) - \lambda \rho_{sol} N + F, \quad (2)$$

где ρ_{sol} – плотность скелета породы, $\text{кг}/\text{м}^3$; N – концентрация радионуклида в твердой фазе, $\text{кг}/\text{кг}$; D_{sol} – коэффициент диффузии в скелете породы, $\text{м}^2/\text{с}$.

Для не больших концентраций примесей зависимость между примесью растворенной в жидкости и адсорбированной в скелете породы можно описать линейной зависимостью [3]:

$$N = \gamma C. \quad (3)$$

Суммируя уравнения (1) и (2) и используя изотерму сорбции (3), получаем следующее уравнение

$$(m + \rho_{sol} \gamma) \frac{\partial C}{\partial t} + mV_{lq} \nabla C = \nabla (mD_{lq} + \rho_{sol} \gamma D_{sol}) \nabla C - \lambda (m + \rho_{sol} \gamma) C, \quad (4)$$

описывающее перенос примесей в пористой среде с учетом конвективной диффузии, сорбции и радиоактивного распада.

Если рассматривать миграцию примесей с поверхности в глубину почвы (одномерный случай), начальные и граничные условия для уравнения (4) можно записать в виде

$$\begin{aligned}
 t = 0: & \quad C(0,0) = C_{sat}, C(x,0) = 0, \\
 x = 0: & \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \\
 x = L: & \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0.
 \end{aligned} \tag{5}$$

Для определение скорости потока влаги в почве (V_{liq}) необходимо решать задачу тепло- и влагопереноса в пористой среде с учетом взаимного влияния температуры, давления пара и жидкости на интенсивность массообмена между фазами.

Рассмотрим систему уравнений, которая описывает процессы тепло-массообмена в пористой среде. Предположим, что переносом теплоты за счет молярного переноса жидкости и пара можно пренебречь, тогда система дифференциальных уравнений, описывающая перенос тепла, пара и жидкости, запишется следующим образом [5]:

$$(\rho C)_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda_{eff} \nabla T) + r_{cv} I, \tag{6}$$

$$m \frac{\partial(\rho_v \theta_v)}{\partial t} = \nabla \left(\frac{K \rho_v f_v}{\eta_v} \nabla P_v \right) + I, \tag{7}$$

$$\rho_{sol} \frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \left(\frac{K \rho_{liq} f_{liq}}{\eta_{liq}} \nabla P_{liq} \right) - I, V_{liq} = - \frac{K f_{liq}}{\eta_{liq}} \nabla P_{liq}, \tag{8}$$

где $(\rho C)_{eff}$ – эффективная теплоемкость среды, Дж/(К.м³); T – температура в пористой среде; K ; λ_{eff} – эффективная теплопроводность среды, Вт/(м.К); r_{cv} – удельная теплота фазового перехода Дж/кг; I – интенсивность массообмена между фазами кг/(м³.с); ρ_v – плотность пара, кг/м³; θ_v – насыщенность пористой среды паром; K – коэффициент проницаемости пористой среды; f_v – относительная фазовая проницаемость пара; η_v – коэффициент динамической вязкости пара, Па.с; P_v – давление пара, Па; u – влагосодержание пористой среды кг/кг; ρ_{liq} – плотность жидкости, кг/м³; f_{liq} – относительная фазовая проницаемость жидкости; P_{liq} – давление жидкости, Па; η_{liq} – коэффициент динамической вязкости жидкости, Па.с.

Для определения интенсивности массообмена между фазами (I), удельной теплоты сорбции (r_{cv}) и зависимости давления жидкости (P_{liq}) от влагосодержания в уравнениях (6) – (8) предлагается использовать экспериментально полученные изотермы сорбции [5, 6]. Обычно изотерма сорбции задается в виде зависимости равновесного значения влагосодержания от относительной влажности паров $\varphi = P_v / P_{sat}$ при фиксированных значениях температуры:

$$u_e = u_e(T, \varphi).$$

Однако более удобно, сначала выразив зависимость давления насыщенного пара (P_{sat}) от температуры как

$$P_{sat} = P_{sat}(T),$$

изотерму сорбции представить в виде

$$u_e = u_e(P_e, T). \tag{9}$$

Используя выражение (9), можно записать следующее уравнение для определения интенсивности массообмена в двухфазной системе [5]:

$$I = \rho_{sol} \frac{\partial u_e}{\partial t} = \rho_{sol} \left[\left(\frac{\partial u_e}{\partial P_e} \right)_T \frac{\partial P_e}{\partial t} + \left(\frac{\partial u_e}{\partial T} \right)_{P_e} \frac{\partial T}{\partial t} \right]. \tag{10}$$

Удельная теплота сорбции находится из соотношения Клайперона – Клаузиуса:

$$r_{cv} = \frac{RT^2}{v_{liq}} \left(\frac{\partial \ln P_e}{\partial T} \right), \tag{11}$$

где v_{liq} – молярная масса жидкости, кг/моль; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль.К).

С помощью обратной функции, выразив из изотермы сорбции (9) зависимость давления пара от влагосодержания и температуры $P_v = F(u_e, T)$ и используя соотношение Клапейрона – Клаузиуса (11), получим выражение для удельной теплоты сорбции:

$$r_{ev} = \frac{RT^2}{v_{lq}} \left(\frac{\partial F(u_e, T)}{\partial T} \right)_{u_e} \quad (12)$$

На основе соотношения Кельвина давление жидкости можно определить по равновесному давлению пара:

$$P_{lq} = P_{sat} + \frac{RT}{v_{lq}} \left(\ln \frac{P_v}{P_{sat}} \right) \quad (13)$$

где v_{lq} – молярный объем жидкости, м³/моль.

Тогда, используя зависимость давления пара от влагосодержания и температуры, получим следующее выражение для давления жидкости:

$$P_{lq} = P_{sat} + \frac{RT}{v_{lq}} \left(\ln F(u_e, T) \right) \quad (14)$$

Плотность пара связана с его давлением уравнением состояния идеального газа:

$$\rho_v = \frac{v_v P_v}{RT} \quad (15)$$

где v_v – молярная масса пара, кг/моль.

Относительные фазовые проницаемости пара и жидкости в уравнениях (7) и (8) можно приближенно вычислить по следующим формулам [5]:

$$f_v = \left(\frac{u_{max} - u}{u_{max} - u_{min}} \right)^\delta, \quad f_{lq} = \left(\frac{u - u_{min}}{u_{max} - u_{min}} \right)^\delta \quad (16)$$

где u_{max} и u_{min} – соответственно максимальное и минимальное значение влагосодержания в почве; δ – коэффициент, выбираемый для лучшего приближения с экспериментальными значениями.

Начальные и граничные условия для системы уравнений (6) – (8) в одномерном случае можно записать в виде:

$$\begin{aligned} t = 0: & \quad T(x, 0) = T_0, \quad P_v(x, 0) = P_{v0} = \phi_0 \cdot P_{sat}(T), \quad u(x, 0) = u_e(P_{v0}, T_0), \\ x = 0: & \quad T(0, t) = T_{ev}, \quad P_v(0, t) = P_{ev} = \phi_{ev} \cdot P_{sat}(T), \quad u(0, t) = u_e(P_{ev}, T_{ev}), \\ x = L: & \quad \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial P_v}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x} = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Таким образом, решая систему уравнений (6) – (8) с использованием замыкающих соотношений (10), (12) и (14) – (16), определяется скорость потока влаги через почву. Используя рассчитанное значение скорости потока влаги для решения уравнения (4) определяется миграция радионуклидов через пористую среду. Аналитическое решение системы уравнений (6) – (8) и уравнения (4) не представляется возможным, поэтому необходимо использовать численные методы. Наиболее перспективным для решения этой задачи является метод конечных элементов в постановке Галёркина [7].

Численные исследования модели. Численное исследование модели проводилось с целью определения возможности ее применения для прогнозирования вертикальной миграции радионуклидов.

Постановка задачи. Предположим, что на поверхности земли образовался радиоактивный след с концентрацией радионуклидов $C_{sur} = 10^{-4}$ кг/м³, с постоянной распада, соответствующей ⁹⁰Sr $\lambda = 7,6 \cdot 10^{-16}$ 1/с. В начальный момент времени ($t = 0$) почва имеет температуру $T_0 = 293$ К и влажность $\phi_0 = 30$ %. Для упрощения принимаем, что на поверхности почвы температура и влажность постоянны и равны соответственно $T_{ev} = 313$ К и $\phi_{ev} = 50$ % (в дальнейшем планируется задавать эти величины в виде функций). Необходимо исследовать динамику миграции радионуклидов в глубину почвы.

При моделировании изотерма сорбции для почвы аппроксимировалась выражением [5]:

$$u_s(P_s, T) = 367935 \exp(-0.033T) \cdot (0.0076P_s)^{-0.96+0.0057T}$$

Решение системы дифференциальных уравнений (6) – (8) с граничными и начальными условиями (5), (17) осуществлялось средствами прикладного пакета FEMLAB, реализующего метод конечных элементов.

В результате численного моделирования получили динамику изменения температур, влагосодержания, скорости потока влаги и концентрации примесей в почве с течением времени (рис. 1, 2).

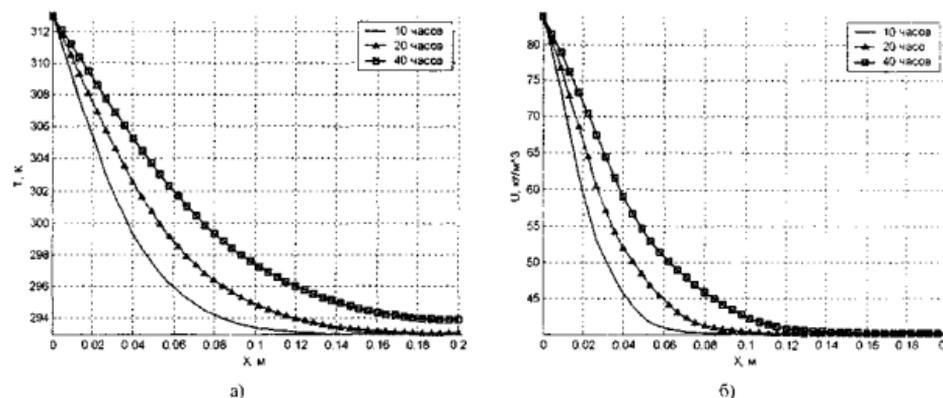


Рис. 1. Результаты моделирования изменения температуры (а) и влагосодержания (б) почвы

На рис. 1, б виден фронт влаги, идущий от поверхности в глубину почвы. Согласно рис. 2, а, скорость потока влаги имеет неравномерное значение по глубине почвы и изменяется с течением времени. Из рис. 2, б видно, как распространяется примесь под воздействием неізотермического влагопереноса и диффузии.

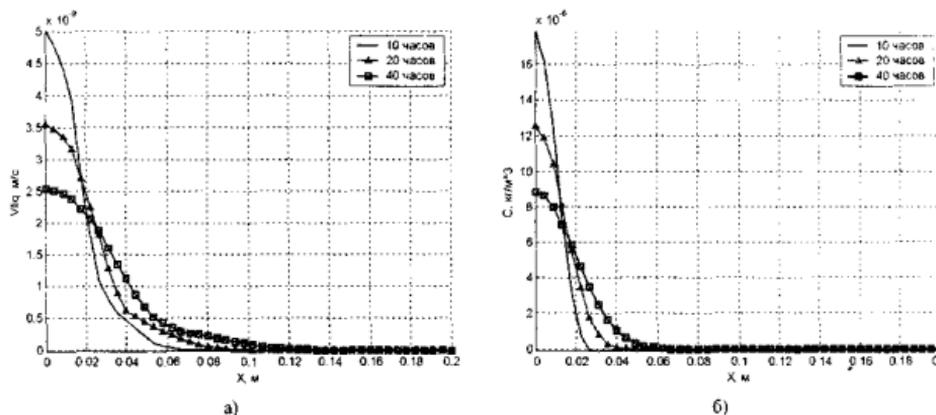


Рис. 2. Результаты моделирования изменение скорости потока жидкости (а) и концентрации примесей (б) в почве

Выводы. Разработана физико-математическая модель миграции примесей в почве, которая базируется на уравнениях конвективной диффузии, теплопроводности, двухфазной фильтрации и формулах Клапейрона – Клаузиуса, Кельвина и экспериментальных изотермах сорбции. Модель позволяет количе-

ственно описать миграцию примесей с учетом неізотермического влагопереноса, конвективной диффузии и радиоактивного распада.

Проведенные численные исследования показали, что модель можно использовать для прогнозирования миграции радионуклидов в глубину почвы и изменения их концентрации на поверхности земли.

Дальнейшие исследования и разработки в этой области будут направлены на экспериментальную верификацию, совершенствование модели и расширение перечня анализируемых с ее помощью экологических задач.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гринчик Н.Н., Кундас С.П. Особенности моделирования конвективной диффузии примесей в почве с учетом влияния неізотермического влагопереноса // Сахаровские чтения 2004 года: экологические проблемы XXI века: Материалы 4-й междунар. конф. Ч. I. - Мн.: МГЭУ им. А.Д. Сахарова, 2004. - С. 200-202.
2. Кудряшов Н.А., Алексеева И.К. Численное моделирование миграции радионуклидов в почве после радиоактивных выпадений // Инженерно-физический журнал. - 2001. - Т. 71, № 6. - С. 976 - 982.
3. Серебряный Г.З., Жемжуров М.Л. Аналитическая модель миграции радионуклидов в пористых средах // Инженерно-физический журнал. - 2003. - Т. 76, № 6. - С. 146 -150.
4. Николаевский В.Н. Механика пористых и трещиноватых сред. - М.: Недра, 1984. - 232 с.
5. К проблеме неізотермического массопереноса в пористых средах / Н.Н. Гринчик, П.В. Акулич, П.С. Куц, Н.В. Павлюкевич, В.И. Терехов // Инженерно-физический журнал. - 2003. - Т. 76, № 6. - С. 129- 141.
6. Гринчик Н.Н. Процессы переноса в пористых средах, электролитах, мембранах. - Мн., 1991. - 251 с.
7. Кундас С.П., Кашко Т.А. Компьютерное моделирование технологических систем: Учеб. пособие: В 2 ч. Ч 1. - Мн.: БГУИР, 2002. - 164 с.