

УДК 532.72:519.63:533.15:631.4

А. П. Власюк*, д-р техн. наук, професор,

В. В. Жуковський**, аспірант

*Міжнародний економіко-гуманітарний університет
імені академіка Степана Дем'янчука, м. Рівне,

**Національний університет водного господарства
та природокористування, м. Рівне

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВЕРТИКАЛЬНОЇ МІГРАЦІЇ РАДІОНУКЛІДІВ В КАТАЛІТИЧНОМУ ПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ У НЕЛІНІЙНОМУ ВИПАДКУ

У статті сформульовано постановку та проведено математичне моделювання задачі вертикальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі в нелінійному випадку. Отримано числовий розв'язок відповідної одновимірної крайової задачі методом скінченних різниць. Проведено серію чисельних експериментів та здійснено їх аналіз.

Ключові слова: масоперенесення, очищення, радіонукліди, частинки мікропористої структури, колоїди, каталітичне пористе середовище, метод скінченних різниць.

Вступ. Господарська діяльність людини призводить до забруднення біосфери, зокрема плодородних земель радіоактивними речовинами. Тому вчені давно шукають механізми для прогнозування впливу на навколишнє середовище радіоактивних осадів та його подальше очищення.

Теорія фільтрації в пористих середовищах, що розглядалася в роботах Полубаринової-Кочини П. Я., Веригіна М. М., Сергієнка І. В., Скопєцького В. В., Дейнеки В. С., Ляшка І. І., Ляшка С. І., Лаврика В. І., Власюка А. П., Бомби, А. Я., Булавацького В. М., Савули Я. Г. та ін., надала математичні описи проблем підземного масоперенесення, методи їх розв'язку, а також співставлення результатів з даними спостережень та експериментів [1–5].

Наступним етапом було врахування дифузії нуклідів, міграція яких представляє радіологічну цікавість. Відповідні математичні моделі розроблені Прохоровим В. М., Власюком А. П., Бураком Я. Й., Чаплею Є. Я., Чернухою О. Ю., Bossew P., Kirchner G. [6–9].

Останні дослідження йдуть ще далі. Вчені розглядають рух колоїдів в мезопористому та мікропористому середовищах, де діаметр пор знаходиться в діапазоні від 2 до 50 нм та менше 2 нанометрів відповідно [10]. Колоїдами (наночастинками) в ґрунті називають природоутворюючі мінеральні фрагменти, гумінові і фульвокислоти, мінеральні осади і мікроорганізми. Їхні розміри лежать в діапазоні від 1 нм до 1000 нм [11].

Транспортні властивості колоїдів в поєднанні з вертикальною міграцією радіонуклідів призводять до різкої зміни міграційної поведінки [12-13]. Такий процес міграції може бути потенційною загрозою для природи і людства у зв'язку з радіо-і хемотоксичністю радіонуклідів.

Разом з тим колоїди можуть відігравати роль сорбентів (цеоліти, органічні добрива). Особливості колоїдів разом з поєднанням сучасних засобів механізації дозволяють пришвидшити процес очищення забруднених територій завдяки застосуванню новітніх технологій меліорації та фільтрів-вловлювачів [14].

Математична модель дифузії в біпористих сорбентах [15] стала основою для врахування впливу мікропористих частинок на технологічні процеси дифузійного масопереносу які досліджувались Фрессардом Ж. [16], Петриком М. Р. [17].

Однак математичне моделювання із застосуванням колоїдів-адсорбентів до процесів очищення радіонуклідів є новим. Тому в даній роботі нами буде розглянута модернізована математична модель вертикальної міграції радіонуклідів в нелінійному випадку.

Постановка задачі. Розглянемо процес очищення горизонтального шару ґрунту від радіонуклідів (наприклад, ^{90}Sr (стронцій-90) або ^{137}Cs (цезій-137)) при їх вертикальній міграції в горизонтальному шарі ґрунту великої протяжності. Локалізація радіонуклідів відбувається завдяки переносу їх фільтраційним потоком зі швидкістю v під впливом конвективної дифузії з врахуванням каталітичного мікропористого середовища при наявності фільтрів-вловлювачів (рис. 1).

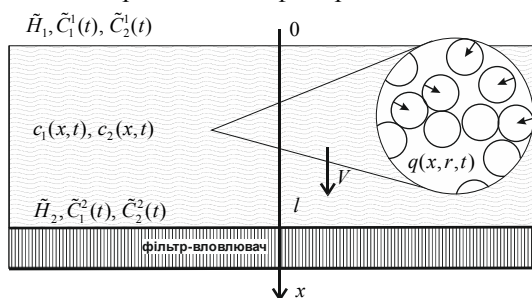


Рис. 1. Вертикальна міграція радіонуклідів в пористому середовищі при наявності фільтра-вловлювача

На глибині l в ґрунті розміщений фільтр-вловлювач, наповнений сорбуючим елементом (наприклад, вермикулітом). Відомі п'єзометричні напори на верхній та нижній (підстилаючій) поверхнях ґрунту \tilde{H}_1 та \tilde{H}_2 ($\tilde{H}_1 > \tilde{H}_2$) відповідно. Також відомий розподіл концентрацій радіонуклідів (мігранту) в початковий момент часу $t = 0$: $\tilde{C}_1^0(x)$ (для части-

нок, що знаходяться в конвективно рухомому поровому розчині), $\tilde{C}_2^0(x)$ (для частинок, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді) та $\tilde{Q}^0(x, r)$. На верхній поверхні ґрунту відомі концентрації $\tilde{C}_1^1(t)$ та $\tilde{C}_2^1(t)$, а на фільтрів-вловлювачі задаються концентрації $\tilde{C}_1^2(t)$, $\tilde{C}_2^2(t)$.

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

Математична модель задачі. Математичну модель поставленої задачі в одновимірному випадку в кожній з підобластей ґрунтового середовища та фільтрів-вловлювачів можна описати наступною крайовою задачею:

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) - \nu(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_2(c_2) \frac{\partial c_2}{\partial x} \right) + \gamma_1 c_1 - \gamma_2 c_2 - \theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 D_0(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (3)$$

$$\nu = -k(c_1) \frac{dh}{dx} + \nu_c(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x}, \quad \text{div} \bar{\nu} + \frac{\partial n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < l, \quad t > 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial q(x, r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (5)$$

$$q(x, r, t) \Big|_{r=R} = k_e \cdot c_2(x, t), \quad 0 < x < l, \quad 0 < r < R, \quad t > 0, \quad (6)$$

$$l_1 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^1(t), \quad l_2 c_1(0, t) = \tilde{C}_1^2(t), \quad (7)$$

$$l_3 c_2(0, t) = \tilde{C}_2^1(t), \quad l_4 c_2(l, t) = \tilde{C}_2^2(t), \quad (8)$$

$$h(0) = \tilde{H}_1, \quad h(l) = \tilde{H}_2, \quad (9)$$

$$c_1(x, 0) = \tilde{C}_1^0(x), \quad c_2(x, 0) = \tilde{C}_2^0(x), \quad q(x, r, 0) = \tilde{Q}^0(x, r), \quad (10)$$

де $c_1(x, t)$, D_1 — концентрація та коефіцієнт конвективної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у фільтраційному потоці; $c_2(x, t)$, D_2 — концентрація та коефіцієнт молекулярної дифузії радіонуклідів, що знаходяться у воді, яка зв'язана зі скелетом ґрунту; $q(x, r, t)$, D_0 — концентрація та коефіцієнт дифузії радіонуклідів у частинках радіуса R , що знаходяться у скелеті ґрунту; k_e — коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового масопереносу на масоперенос в скелеті ґрунту; ν — швидкість фільтрації; k — коефіцієнт фільтрації води з

мігрантами; γ_1, γ_2 — коефіцієнти масообміну; σ_1 — пористість ґрунту; $x \in [0; l]$ — вертикальна координата, напрямлена вертикально вниз, $l_i, i = \overline{1, 4}$ — диференціальні оператори, що задають граничні умови відповідно при $x = 0$ та $x = l$; t — час, $0 < t < t_1$.

Рівняння (1) описує процес міграції радіонуклідів з концентрацією c_1 шляхом конвективної дифузії у фільтраційному потоці (конвективно рухомому поровому розчині); (2) описує процес міграції радіонуклідів, що знаходяться у зв'язаній зі скелетом ґрунту воді; (3) описує внутрішньочастинковий масоперенос радіонуклідів з поточною концентрацією q , що зв'язана із концентрацією c_2 умовою (6); (4) описує фільтрацію в каталітичному пористому середовищі. Крайові умови для концентрацій $c_1(x, t)$, $c_2(x, t)$, $q(x, r, t)$ та напору $h(x)$ мають вигляд (7)–(10).

В результаті різниці напорів відбувається перенесення розчинених у воді речовин фільтраційним потоком. При цьому процеси фільтрації розчинених у воді речовин підлягають законам Дарсі та Фіка.

Чисельний розв'язок крайової задачі методом скінченних різниць. Для знаходження числового розв'язку крайової задачі (1)–(10) використаємо метод скінченних різниць. Для цього запишемо неявну різницеву схему для рівняння (2), а для (1) та (3) використаємо монотонну різницеву схему Самарського [18].

Введемо різницеву сітку $\omega_{h_1, h_2, \tau}$ з кроками h_1, h_2 і τ по осях Ox, Or та Ot для змінних x, r, t

$$\omega_{h_1, h_2, \tau} = \left\{ (x_i, r_j, t_k) \left| \begin{array}{l} x_i = ih_1, r_j = jh_2, t_k = k\tau, \\ i = \overline{0, n_1}, j = \overline{0, n_2}, k = \overline{0, n_3}, \\ h_1 n_1 = l, h_2 n_2 = R, \tau n_3 = T, \end{array} \right. \right\} \quad (11)$$

де n_1, n_2, n_3 — кількість кроків по просторових змінних та часу відповідно.

Для дискретизації рівняння (1) використаємо монотонну різницеву схему Самарського [18]. В результаті скінченнорізницевої аналог диференціального рівняння (1) матиме наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \sigma_1 \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k)}}{\tau} = & \chi_i^{(k)} \left(d_{1,i+1}^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{h_1} - d_{1,i}^{(k)} \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \\ & + \frac{(r^+)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} d_{1,i+1}^{(k)} \frac{c_{1,i+1}^{(k+1)} - c_{1,i}^{(k+1)}}{h_1} + \frac{(r^-)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} d_{1,i}^{(k)} \frac{c_{1,i}^{(k+1)} - c_{1,i-1}^{(k+1)}}{h_1} - \\ & - \gamma_1 c_{1,i}^{(k+1)} + \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$c_{1,i}^{(0)} = \tilde{C}_1^0(x_i), \quad c_{1,0}^{(k)} = \tilde{C}_1^1(t_k), \quad c_{1,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_1^2(t_k), \quad (13)$$

де $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

Тут введені наступні позначення:

$$d_{1,i}^{(k)} = \frac{D_{1,i}^{(k)} + D_{1,i-1}^{(k)}}{2}, \quad D_{1,i}^{(k)} = D_1(c_{1,i}^{(k)}),$$

$$\chi_i^{(k)} = \frac{1}{1 + \frac{h_1 |r_i^{(k)}|}{2D_{1,i}^{(k)}}} = 1 - \frac{h_1 |r_i^{(k)}|}{2D_{1,i}^{(k)}} + O(h_1^2), \quad r_i^{(k)} = (r^+)_i^{(k)} + (r^-)_i^{(k)},$$

$$(r^+)_i^{(k)} = \frac{-v_i^{(k)} + |v_i^{(k)}|}{2} \geq 0, \quad (r^-)_i^{(k)} = \frac{-v_i^{(k)} - |v_i^{(k)}|}{2} \leq 0.$$

Для знаходження концентрації солей $c_1(x, t)$ з різницевого рівняння (12) використаємо метод прогонки. Для цього представимо різницеву схему (12), (13) у такому вигляді:

$$\begin{cases} a_i^1 c_{1,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^1 c_{1,i}^{(k+1)} + b_i^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} = -c_{1,i}^{(k)} - f_i^{1,(k+1)}, \\ c_{1,0}^{(k+1)} = \mu_1^1 c_{1,1}^{(k+1)} + \mu_2^1, \\ c_{1,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^1 c_{1,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^1, \end{cases} \quad (14)$$

де

$$a_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1} \frac{d_{1,i}^{(k)}}{h_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1} - \frac{(r^-)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} \right), \quad b_i^1 = \frac{\tau}{\sigma_1} \frac{d_{1,i+1}^{(k)}}{h_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)}}{h_1} + \frac{(r^+)_i^{(k)}}{D_{1,i}^{(k)}} \right),$$

$$\bar{c}_i^1 = 1 + \frac{\tau}{\sigma_1} \left(\frac{\chi_i^{(k)} (d_{1,i+1}^{(k)} + d_{1,i}^{(k)})}{h_1^2} + \frac{1}{h_1 D_{1,i}^{(k)}} \left((r^+)_i^{(k)} d_{1,i+1}^{(k)} - (r^-)_i^{(k)} d_{1,i}^{(k)} \right) + \gamma_1 \right),$$

$$f_i^{1,(k+1)} = \frac{\tau}{\sigma_1} \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)}, \quad \mu_1^1 \equiv 0, \quad \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1, \quad \mu_3^1 \equiv 0, \quad \mu_4^1 \equiv \tilde{C}_1^2.$$

Можна показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^1| > |a_i^1| + |b_i^1|$ виконуються. Значення концентрації на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$c_{1,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^1 c_{1,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^1, \quad (15)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1}^1 = \frac{b_i^1}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \quad \beta_{i+1}^1 = \frac{a_i^1 \beta_i^1 + c_{1,i}^{(k)} + f_i^{1,(k+1)}}{\bar{c}_i^1 - \alpha_i^1 a_i^1}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_1^1 = \mu_1^1 \equiv 0, \quad \beta_1^1 = \mu_2^1 \equiv \tilde{C}_1^1.$$

Для дискретизації різницевого рівняння (2) використовуємо неявну різницеву схему. Конвективний член $\theta \frac{\partial q}{\partial r} \Big|_{r=R}$ диференціального рівняння (2) апроксимуємо з точністю до другого порядку [19]. Скінченнорізницевий аналог відповідного диференціального рівняння матиме наступний вигляд:

$$\frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{h_1} \left(d_{2,i+1}^{(k)} \frac{c_{2,i+1}^{(k+1)} - c_{2,i}^{(k+1)}}{h_1} - d_{2,i}^{(k)} \frac{c_{2,i}^{(k+1)} - c_{2,i-1}^{(k+1)}}{h_1} \right) + \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \gamma_2 c_{2,i}^{(k+1)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \quad (16)$$

$$c_{2,i}^{(0)} = \tilde{C}_2^0(x_i), \quad c_{2,0}^{(k)} = \tilde{C}_2^1(t_k), \quad c_{2,n_1}^{(k)} = \tilde{C}_2^2(t_k), \quad (17)$$

де $d_{2,i}^{(k)} = \frac{D_{2,i}^{(k)} + D_{2,i-1}^{(k)}}{2}$, $D_{2,i}^{(k)} = D_2(c_{2,i}^{(k)})$, $i = \overline{1, n_1 - 1}$, $k = \overline{0, n_3}$.

В прогнотичному вигляді рівняння (16) запишеться

$$\begin{cases} a_i^2 c_{2,i-1}^{(k+1)} - \bar{c}_i^2 c_{2,i}^{(k+1)} + b_i^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} = -f_i^{2,(k+1)}, \\ c_{2,0}^{(k+1)} = \mu_1^2 c_{2,1}^{(k+1)} + \mu_2^2, \\ c_{2,n_1}^{(k+1)} = \mu_3^2 c_{2,n_1-1}^{(k+1)} + \mu_4^2, \end{cases} \quad (18)$$

де

$$a_i^2 = \frac{d_{2,i}^{(k)}}{h_1^2}, \quad b_i^2 = \frac{d_{2,i+1}^{(k)}}{h_1^2}, \quad \bar{c}_i^2 = \frac{d_{2,i+1}^{(k)} + d_{2,i}^{(k)}}{h_1^2} + \frac{1}{\tau} + \gamma_2, \\ f_i^{2,(k+1)} = \frac{c_{2,i}^{(k)}}{\tau} + \gamma_1 c_{1,i}^{(k)} - \theta \left(\frac{\frac{3}{2} q_{n_2}^{(k+1)} - 2q_{n_2-1}^{(k+1)} + \frac{1}{2} q_{n_2-2}^{(k+1)}}{h_2} \right), \\ \mu_1^2 \equiv 0, \quad \mu_2^2 = \tilde{C}_2^1, \quad \mu_3^2 \equiv 0, \quad \mu_4^2 \equiv \tilde{C}_2^2.$$

Неважко показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_i^2| > |a_i^2| + |b_i^2|$ виконуються. Значення концентрації $c_2(x, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$c_{2,i}^{(k+1)} = \alpha_{i+1}^2 c_{2,i+1}^{(k+1)} + \beta_{i+1}^2, \quad (19)$$

$$\text{де } \alpha_{i+1}^2 = \frac{b_i^2}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2}, \quad \beta_{i+1}^2 = \frac{a_i^2 \beta_i^2 + f_i^{2,(k+1)}}{\bar{c}_i^2 - \alpha_i^2 a_i^2}, \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_1^2 = \mu_1^2 \equiv 0, \quad \beta_1^2 = \mu_2^2 \equiv \tilde{C}_2^1.$$

Різницєва схема для (3), (5), (6) матиме наступний вигляд:

$$\frac{q_j^{(k+1)} - q_j^{(k)}}{\tau} = \frac{1}{r^2 h_2} \left(d_{0,j+1}^{(k)} \frac{q_{j+1}^{(k+1)} - q_j^{(k+1)}}{h_2} - d_{0,j}^{(k)} \frac{q_j^{(k+1)} - q_{j-1}^{(k+1)}}{h_2} \right), \quad (20)$$

$$q_j^{(0)} = \tilde{Q}^0(x_i, r_j), \quad q_{n_2}^{(k)} = k_e c_{2,i}^{(k)}, \quad (21)$$

$$\text{де } d_{0,j}^{(k)} = \frac{r^2}{2} (D_{0,j}^{(k)} + D_{0,j-1}^{(k)}), \quad D_{0,j}^{(k)} = D_0(q_j^{(k)}), \quad i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1},$$

$$k = \overline{0, n_3}.$$

В прогнотичному вигляді рівняння (20) запишеться

$$\begin{cases} a_j^3 q_{j-1}^{(k+1)} - \bar{c}_j^3 q_j^{(k+1)} + b_j^3 q_{j+1}^{(k+1)} = -f_j^{3,(k+1)}, \\ q_0^{(k+1)} = \mu_1^3 q_1^{(k+1)} + \mu_2^3, \\ q_{n_2}^{(k+1)} = \mu_3^1 q_{n_2-1}^{(k+1)} + \mu_4^3, \end{cases} \quad (22)$$

де

$$a_j^3 = \frac{d_{0,j}^{(k)}}{r^2 h_2^2}, \quad b_j^3 = \frac{d_{0,j+1}^{(k)}}{r^2 h_2^2}, \quad \bar{c}_j^3 = \frac{d_{0,j+1}^{(k)} + d_{0,j}^{(k)}}{r^2 h_2^2} + \frac{1}{\tau}, \quad f_j^{3,(k+1)} = \frac{q_j^{(k)}}{\tau},$$

$$\mu_1^3 \equiv 1, \quad \mu_2^3 = 0, \quad \mu_3^3 \equiv 0, \quad \mu_4^3 \equiv 0.$$

Легко показати, що умови стійкості прогонки $|\bar{c}_j^3| > |a_j^3| + |b_j^3|$ виконуються. Значення концентрації $q(x, r, t)$ на часовому шарі $(k+1)$ знаходимо методом прогонки, використовуючи співвідношення

$$q_j^{(k+1)} = \alpha_{j+1}^3 q_{j+1}^{(k+1)} + \beta_{j+1}^3, \quad (23)$$

$$\text{де } \alpha_{j+1}^3 = \frac{b_j^3}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad \beta_{j+1}^3 = \frac{a_j^3 \beta_j^3 + f_j^{3,(k+1)}}{\bar{c}_j^3 - \alpha_j^3 a_j^3}, \quad j = \overline{1, n_2 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3},$$

$$\alpha_1^3 = \mu_1^3 \equiv 1, \quad \beta_1^3 = \mu_2^3 \equiv 0.$$

Скінченнорізницєвий аналог закону (4) для обчислення швидкості фільтрації має наступний вигляд:

$$v_i^{(k)} = -k_i^{(k)} (c_{1,i}^{(k)}) \frac{h_{i+1}^{(k)} - h_{i-1}^{(k)}}{2h_1} + (v_c)_i^{(k)} (c_{1,i}^{(k)}) \frac{c_{1,i+1}^{(k)} - c_{1,i-1}^{(k)}}{2h_1}, \quad (24)$$

$$i = \overline{1, n_1 - 1}, \quad k = \overline{1, n_3}.$$

Програмна реалізація. Для аналізу і порівняння лінійної та нелінійної математичних моделей вищенаведеної задачі було використано методологію об'єктно-орієнтованого програмування [20]. Це дозволило в короткі терміни побудувати необхідну ієрархію класів з можливістю подальшого ускладнення існуючих моделей. Для чисельного моделювання процесу вертикальної міграції радіонуклідів розроблено інтелектуальний інтерфейс на базі кросплатформенного фреймворку Qt. Він дозволяє легко керувати вихідними даними (коефіцієнтами дифузії, пористості, дисперсії, краєвими умовами тощо), виконує необхідні обчислення, будує 2D/3D графіки та таблиці значень концентрацій $c_1(x, t)$, $c_2(x, t)$, $q(x, r, t)$, швидкості фільтрації $v(x, t)$. Всі отримані значення легко імпортуються у файли популярних форматів для подальшої обробки.

Результати чисельних експериментів та їх аналіз. Використавши створений програмний комплекс було проведено ряд експериментів. Зокрема було розглянуто задачу локалізації радіонуклідів протягом 5 років з такими вихідними параметрами:

$$\begin{aligned}
 l &= 10 \text{ м}, \quad \tilde{H}_1 = 1 \text{ м}, \quad \tilde{H}_2 = 0,1 \text{ м}, \quad \sigma_1 = 0,4, \\
 \tau &= 30 \text{ діб}, \quad \gamma_1 = \gamma_2 = 0,0065, \quad k_e = 1, \quad R = 5 \cdot 10^{-5} \text{ м}, \\
 D_2 &= 1 \cdot 10^{-5} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, \quad D_0 = 2 \cdot 10^{-6} \frac{\text{м}^2}{\text{доба}}, \\
 \tilde{C}_1^1(t) &= 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \tilde{C}_1^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \tilde{C}_2^1(t) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \tilde{C}_2^2(t) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \\
 \tilde{C}_1^0(x) &= 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \tilde{C}_2^0(x) = 5 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \tilde{Q}^0(x, r) = 0 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}.
 \end{aligned}$$

Зазвичай в цілях спрощення коефіцієнт конвективної дифузії задають лінійно залежним від швидкості фільтрації [1]:

$$D_{1,i}^{(k)} = D_\mu + \lambda |v_i^{(k)}|, \quad i = 1, n_1 - 1, \quad k = 1, n_3,$$

де D_μ — коефіцієнт молекулярної дифузії в пористому середовищі, λ — параметр дисперсії.

Прийнято наступну залежність коефіцієнта фільтрації від концентрації соляного розчину для піщаних ґрунтів [5]:

$$k(c) = a_5^1 \cdot c^5 + a_4^1 \cdot c^4 + a_3^1 \cdot c^3 + a_2^1 \cdot c^2 + a_1^1 \cdot c + a_0^1,$$

де $a_5^1 = 5,9404 \cdot 10^{-2}$, $a_4^1 = -1,6703 \cdot 10^{-1}$, $a_3^1 = 1,7051 \cdot 10^{-1}$, $a_2^1 = -7,4311 \cdot 10^{-2}$, $a_1^1 = 1,0563 \cdot 10^{-2}$, $a_0^1 = 1,0054 \cdot 10^{-3}$.

Після проведення серії чисельних експериментів отримано графіки полів швидкостей фільтрації $v(x, t)$, розподілу концентрації солевих розчинів по області фільтрації для різних значень коефіцієнта

фільтрації та коефіцієнта конвективної дифузії D_0 (порівняння лінійної та нелінійної залежностей). Також продемонстровано вплив колоїдних частинок на процес міграції радіонуклідів.

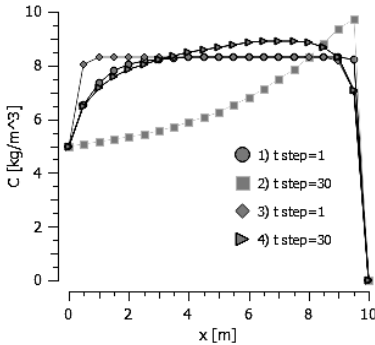


Рис. 2. Розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x для коефіцієнта фільтрації $k = const$ (графіки 1, 2) і $k = k(x, c_1)$ (графіки 3,4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 2,5 роки, 3) 30 діб, 4) 2,5 роки

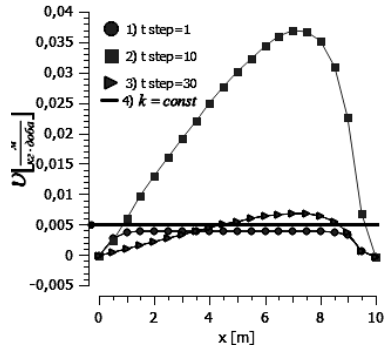


Рис. 3. Розподіл швидкості фільтрації $v(x)$ для нелінійної залежності коефіцієнта фільтрації $k = k(x, c_1)$ (графіки 1, 2, 3) і $k = const$ (графік 4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 1 рік, 3) 2,5 роки

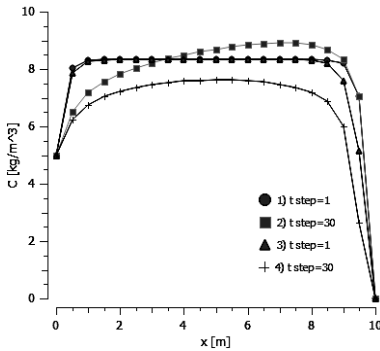


Рис. 4. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x для коефіцієнта дисперсії $\lambda = 1$ (графіки 1, 2) і $\lambda = 8$ (графіки 3,4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 2,5 роки, 3) 30 діб, 4) 2,5 роки

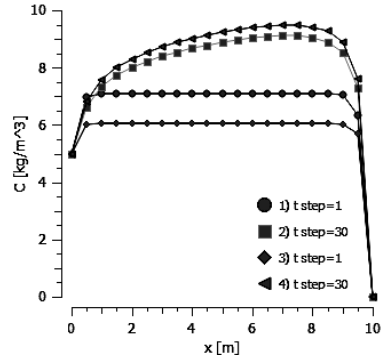


Рис. 5. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ від глибини шару ґрунту x для щільного піску $\sigma = 0,4$ (графіки 1, 2) і пухкого $\sigma = 0,8$ (графіки 3,4) при різних часових кроках: 1) 30 діб, 2) 2,5 роки, 3) 30 діб, 4) 2,5 роки

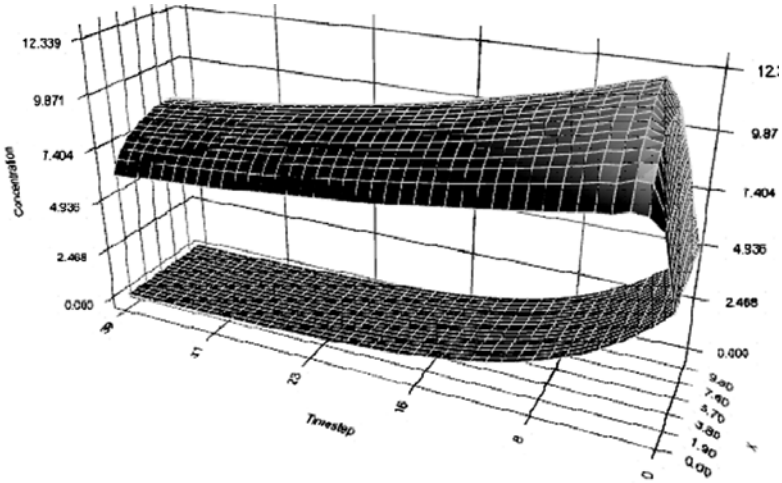


Рис. 6. Розподіл концентрацій $c_1(x)$ та $c_2(x)$ протягом часу T

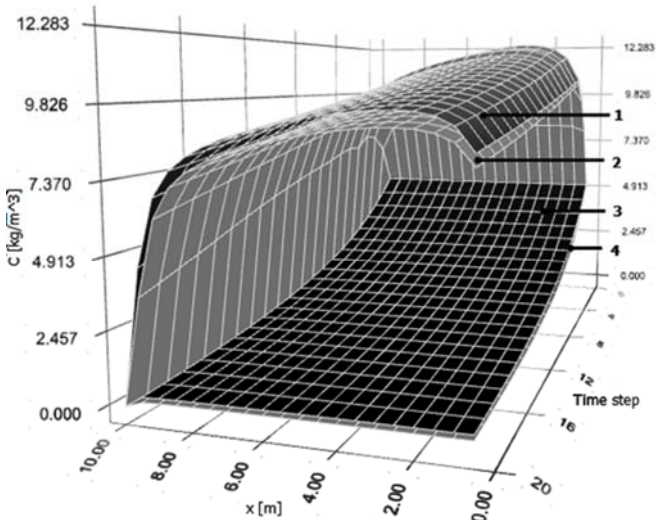


Рис. 7. Порівняльні розподіли концентрацій $c_1(x)$ та $c_2(x)$ протягом часу T від глибини шару ґрунту x протягом 20 міс. з врахування дифузії радіонуклідів у частинках радіусу R (графіки 1, 3) та без врахування (графіки 2, 4)

Висновки. В результаті роботи сформульовано постановку та побудовано математичну модель вертикальної міграції радіонуклідів з врахуванням нелінійного характеру коефіцієнта дифузії. Чисельний розв'язок знайдено методом скінченних різниць. Створено програмний

продукт для реалізації поставленої крайової задачі та проведено чисельні експерименти. Аналіз отриманих результатів (графіки, таблиці) дозволив зробити ряд висновків. Зокрема помітно, що розподіл концентрації сольових розчинів з часом при $k = k(x, c_1)$ є більш повільним і прогнозованим (рис. 2). Дана стабільність досягається за рахунок поступового спадання та насичення в часі швидкості фільтрації (рис. 3) при нелінійній залежності коефіцієнта фільтрації. При збільшенні параметра дисперсії λ сольовий розчин значно швидше розподіляється в шарі ґрунту (рис. 4). В пухкому піску (коефіцієнт пористості $\sigma = 0,8$) концентрація сольових розчинів набагато інтенсивніше розподіляється по області фільтрації. Також стає очевидним вплив мікрочастинок на швидкість міграції радіонуклідів. Зокрема, як видно з рис. 7, при врахуванні дифузії радіонуклідів у колоїдах, процес фільтрації відбувається швидше. Дану властивість можна використати для очищення родючого шару ґрунту і відновлення людської діяльності.

Список використаних джерел:

1. Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917-1967) / ред. В. Ентов, С. Нумеров, П. Полубаринова-Кочина, И. Чарный. — М. : Наука, 1969. — 546 с.
2. Веригин Н. Н. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей В пористых средах / Н. Н. Веригин, Б. С. Шержуков // Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917-1967). — 1969. — С. 237–313.
3. Сергиенко И. В. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах / И. В. Сергиенко, В. В. Скопецкий, В. С. Дейнека. — К. : Наукова думка, 1991. — 432 с.
4. Ляшко С.И. Оптимизация и математическое моделирование массопереноса подземных вод / С. И. Ляшко. — К. : Наук. думка, 1998. — 256 с.
5. Власюк А. П. Экспериментальні дослідження деяких параметрів фільтрації сольових розчинів у піщаних ґрунтах / А. П. Власюк, М. Кузло // Меліорація та водне господарство : міжвідомчий тематич. наук. зб. — 2000. — Вип. 87. — С. 43–46.
6. Прохоров В.М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах / В. М. Прохоров ; ред. Р. М. Алексахин. — Энергоиздат, 1981. — 99 с.
7. Бурак Я. Й. Вихідні положення математичної моделі гетеродифузного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі / Я. Й. Бурак, С. Я. Чапля // Доп. НАН України. — 1993. — Т. 10. — С. 59–63.
8. Власюк А. П. Числове моделювання міграції радіонуклідів при горизонтальній фільтрації підземних вод / А. П. Власюк, О. П. Остапчук // Тез. доп. Міжнародної школи-семінару «Прогнозування та прийняття рішень в умовах невизначеності». — 2006. — С. 180–181.
9. Bossew P. Modelling the vertical distribution of radionuclides in soil. Part 1: the convection–dispersion equation revisited / P. Bossew, G. Kirchner // Journal of Environmental Radioactivity. — 2004. — Vol. 73, №2. — P. 127–150.

10. Recommendations for the characterization of porous solids (Technical Report) / J. Rouquerol, D. Avnir, C.W. Fairbridge [and other] // Pure and Applied Chemistry. — 1994. — Vol.66, №8.
11. Natarajan N. Radionuclide and colloid co-transport in a coupled fracture-skin-matrix system / N. Natarajan, G. Suresh Kumar // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. — 2010. — Vol. 370, №1-3. — P. 49–57.
12. Modeling Colloid Attachment, Straining, and Exclusion in Saturated Porous Media / S. A. Bradford, J. Simunek, M. Bettahar [and other] // Environmental Science & Technology. — 2003. — Vol. 37, № 10. — P. 2242–2250.
13. Cheng T. Colloid-Facilitated Transport of Cesium in Vadose-Zone Sediments: The Importance of Flow Transients / T. Cheng, J. E. Saiers // Environmental Science & Technology. — 2010. — Vol. 44, №19. — P. 7443–7449.
14. Клименко О. Машина для внесення меліорантів в рідкому стані / О. Клименко // Вісник Рівненського державного технічного університету : збірник наукових праць. — 2000. — Вип. 1 (3). — С. 161–166.
15. Ruckenstein E. Sorption by solids with bidisperse pore structures / E. Ruckenstein, A. Vaidyanathan, G. Youngquist // Chemical Engineering Science. — 1971. — Vol. 26, №9. — P. 1305–1318.
16. Conner W. C. Fluid transport in nanoporous materials / W. C. Conner, J. P. Fraissard. — Dordrecht, the Netherlands: Springer in cooperation with NATO Public Diplomacy Division, 2006. — 1 online resource (xii, 685).
17. Петрик М. Математичне моделювання адсорбційного нелінійного масопереносу в каталітичних пористих середовищах / М. Петрик, Д.М. Михайлик // Вісник ТДТУ ім. І. Пулюя. — 2009. — Т. 4. — С. 193–198.
18. Самарский А. А. Теория разностных схем : учеб. пособие для вузов по спец. «Прикл. математика» / А. А. Самарский. — М. : Наука, 1989. — 616 с.
19. Демидович Б. П. Численные методы анализа / Б. П. Демидович, И. А. Марон, Э. 3. Шувалова. — М. : Наука, 1967. — 368 с.
20. Gamma E. Design patterns / E. Gamma. — Reading, Mass : Addison-Wesley, 1995. — 395 p.

In the article was formulated the statement and carried out the mathematical modelling of radionuclides vertical migration process in catalytic porous media in nonlinearly mode. There is obtained the numerical solution of respective one-dimensional boundary value problem by the method of finite differences. Using created software a series was conducted of numerical experiments and their analysis.

Key words: *mass transfer, refinement, microporous particles, colloid, catalytic porous media, method of finite differences, radionuclide migration.*

Отримано: 20.03.2015