

В.Є. Гончарук, В.А. Дмитрук, О.Ю. Чернуха
Національний університет “Львівська політехніка”,
Центр математичного моделювання при ІППММ НАН України, Львів

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МІГРАЦІЇ ЦЕЗІЮ-137 У ДОЛОМІТІ

@ Гончарук В.Є., Дмитрук В.А., Чернуха О.Ю., 2012

Розроблено пакет програм та досліджено стаціонарні процеси міграції екологічно небезпечної речовини – цезію-137 у шарі ґрунту, утвореному монокристалом доломіту, з метою оцінки захисних здатностей мінералу та прогнозування захищеності ґрунтових вод від радіаційного забруднення. Продемонстровано розподіли концентрацій ^{137}Cs у структурних елементах шару та потоків агресивної речовини через задані перерізи. Проаналізовано отримані сумарні концентрації та потоки ^{137}Cs , усереднені за шириною.

Ключові слова: процес міграції, цезій-137, доломіт, пакет програм

Software is designed and steady-state processes of migration of environmentally hazard admixture as cesium-137 is studied in a soil layer formed by monocrystals of dolomite. Computer modelling are carried out for evaluating protective ability of the mineral as well as prediction protectability of ground water against radioactive pollution. Distributions of ^{137}Cs concentration in structural layer elements and flows of aggressive substance through the given surfaces are demonstrated. It is analysed the obtained total concentrations and flows of ^{137}Cs averaged over body width.

Key words: migration process, cesium-137, dolomite, software

Мета роботи полягає у розробленні та створенні пакета програм для комп'ютерного моделювання міграції забруднень типу важких металів у приповерхневих шарах Землі; застосуванні до моделювання та аналізу масопереносу ^{137}Cs у доломіті.

Постановка проблеми

Серед техногенних радіонуклідів особливу небезпеку становлять радіоактивні ізотопи цезію, особливо цезій-137, що існує тривало, з періодом піврозпаду $30 \pm 0,2$ років. Потрапляння цезію-137 в довкілля більшою мірою визначає радіаційну небезпеку довгий час. Для цього радіонукліда характерна висока рухливість в екологічних ланцюгах природного середовища і здатність накопичуватися в його окремих ланках [1]. Основним джерелом утворення цезію-137 є випробування ядерної зброї та підприємства ядерної енергетики. Радіонуклід у великих кількостях накопичується в ядерних реакторах у процесі їхньої експлуатації. В умовах нормальної експлуатації АЕС радіоактивні викиди є незначними і залежать від конструкції ядерного реактора, типу системи очищення від радіоактивних речовин та повітря, яке викидається зі станції, часу експлуатації реактора тощо. Згідно з опублікованими даними [2], у 2000 р. реактори АЕС усіх країн світу в атмосфері викинули близько $22,2 \times 10^{19}$ Бк ^{137}Cs .

Забруднювачами навколишнього середовища цезієм-137 також можуть бути заводи з переробки відпрацьованих твелів [2]. Викид ^{137}Cs здійснюється не тільки в атмосферу, але й в океани з атомних підводних човнів, танкерів, криголамів, які оснащені ядерно-енергетичними установками.

Радіоізотопи цезію застосовуються у хімічних дослідженнях, у гамма-дефектоскопії, радіаційній технології, радіобіологічних експериментах тощо. ^{137}Cs використовується як джерело випромінювання для контактної та дистанційної променевої терапії, а також для радіаційної стерилізації.

Надзвичайно велика загроза для навколишнього середовища від радіоактивного цезію виникає при аваріях АЕС, коли значно збільшуються його викиди. Дози опромінення при цьому різко зростають і коливаються залежно від масштабів аварії та ефективності заходів з її ліквідації.

Так, порівнявши масштаби аварій на АЕС в Чорнобилі (рис. 1) та Фукусімі (рис. 2), можна зробити висновки, що у Фукусімі вони більші, але завдяки ефективнішим заходам вдалося уникнути такого поширення ^{137}Cs , як у Чорнобильській зоні.

Зазначимо, що рівень забруднення радіоактивним цезієм навколишнього середовища залежить також від фізико-географічних та кліматичних особливостей регіонів, розподілу атмосферних опадів та інших природних чинників.

Тому наукові дослідження, зокрема за допомогою комп'ютерного моделювання, яке базується на отриманих точних розв'язках контактної-крайової задачі дифузії домішкової речовини у двофазних регулярних структурах, міграції цезію-137 при поверхневому забрудненні ґрунту, утвореного доломітовою крихтою, враховуючи складну структуру цього мінералу, є актуальною і сьогоденною проблемою.

Аналіз останніх досліджень

Як відомо, доломіт широко використовували (разом з бором, свинцем і глиною) для засипання активної зони 4-го енергоблока при ліквідації аварії на Чорнобильській АЕС [1] та при ліквідації наслідків аварії на АЕС «Фукусіма-1». Тому його здатності захищати від радіаційного забруднення потрібно ретельно вивчити. Як забруднювальну речовину розглянуто ^{137}Cs .

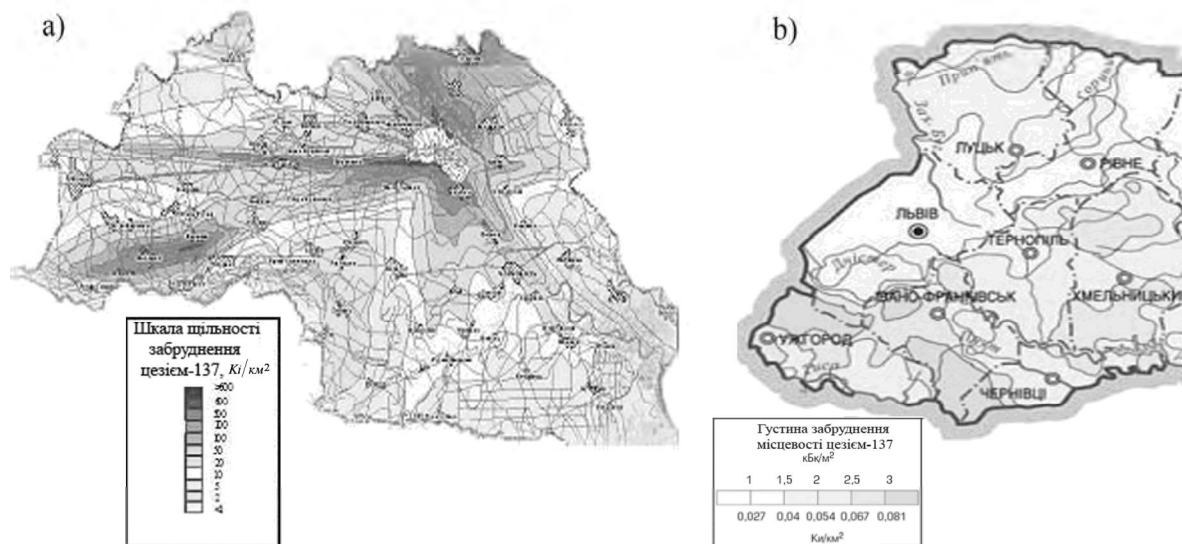


Рис. 1. Зони забруднення ^{137}Cs території Чорнобильської зони відчуження (а) та території Західної України (1996 р.) (б) [3, 4]

Міграція забруднень (типу важких металів, зокрема, радіонуклідів, нітратних сполук, пестицидів) у ґрунті переважно зумовлена дифузією у водних розчинах та макроскопічним рухом приповерхневих і ґрунтових вод [1, 6–8]. Якщо моделювати структуру ґрунту як сукупність мінеральних монокристалів, які утворюють пористий скелет [9] і розділені тонкими каналами швидкого переміщення забруднюючих частинок, то для визначення просторового розподілу їхньої концентрації при поверхневому забрудненні ґрунту можна використати розв'язок контактної-крайової задачі дифузії домішкової речовини у горизонтально регулярних структурах з урахуванням конвективного перенесення в одній з фаз [10, 11].

Структура ґрунту моделюється як шар товщини x_0 , що складається з періодично розташованих прошарків двох типів: монокристалів доломіту та тонких каналів швидкого переміщення ^{137}Cs (рис. 3, а). Виділяємо фізично репрезентативний елемент тіла, для якого приймаємо, що область тонкого каналу з коефіцієнтом дифузії D_1 має ширину $2L$, а область монокристала з коефіцієнтом $D_2 = 2l$. Крім цього, в областях з коефіцієнтом дифузії D_1 масоперенесення відбувається за конвективно-дифузійними механізмом зі швидкістю конвективного перенесення v , яка вважається відомою і сталою.

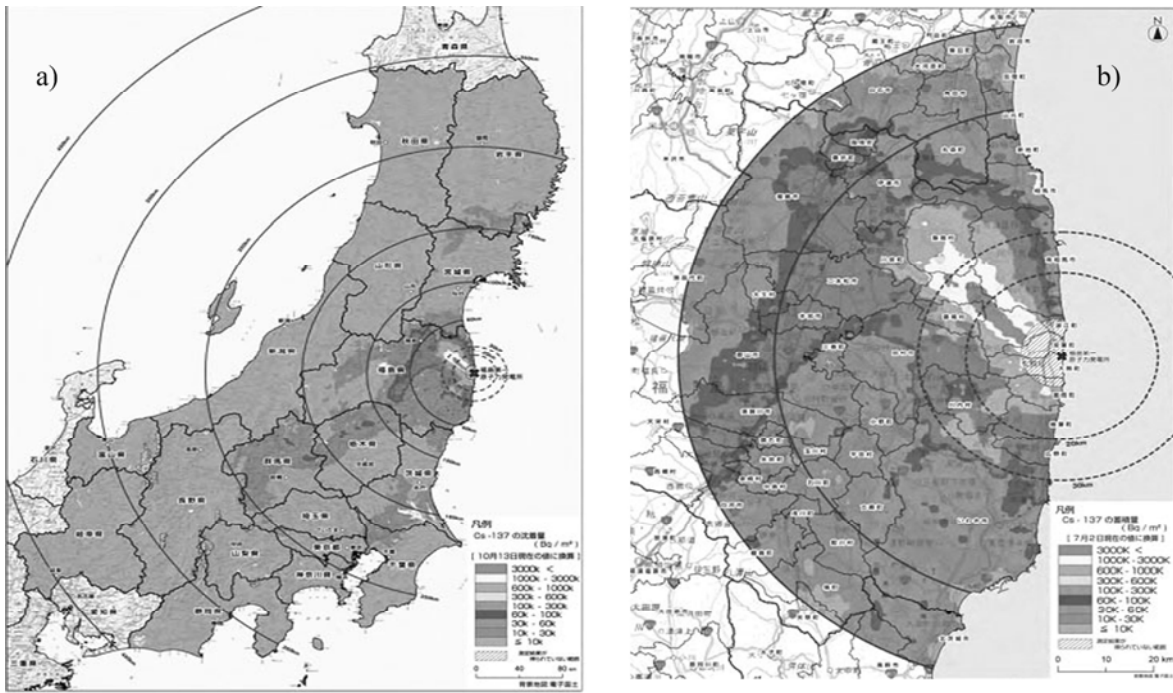


Рис. 2. Зони забруднення ^{137}Cs території Японії (а) та 80-кілометрової зони АЕС "Фукусіма-1" (2011 р.) (2b) [5]

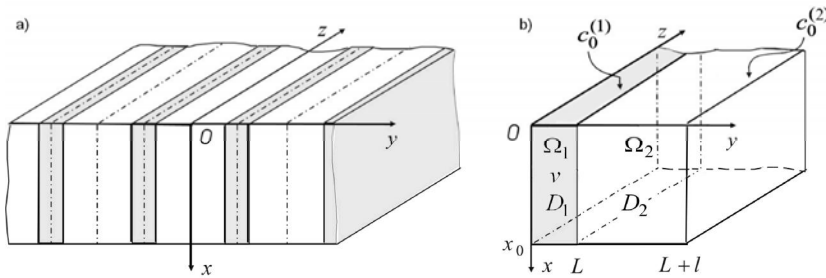


Рис. 3. Горизонтально періодична структура тіла та його виділений елемент

У стаціонарному випадку концентрація домішкової речовини $c_1^\infty(x, y)$ в області $\Omega_1 =]0; x_0[\times]0; L[$ визначається з рівняння

$$D_1 \left[\frac{\partial^2 c_1^\infty(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1^\infty(x, y)}{\partial y^2} \right] - v \frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial x} = 0, \quad (x, y) \in \Omega_1. \quad (1)$$

В області $\Omega_2 =]0; x_0[\times]L; L+l[$ концентрація частинок домішки $c_2^\infty(x, y)$ задовольняє рівняння

$$D_2 \left[\frac{\partial^2 c_2^\infty(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_2^\infty(x, y)}{\partial y^2} \right] = 0, \quad (x, y) \in \Omega_2. \quad (2)$$

Граничні умови для цього випадку мають вигляд:

$$c_1^\infty(x, y) \Big|_{x=0} = c_0^{(1)} \equiv const, \quad c_2^\infty(x, y) \Big|_{x=0} = c_0^{(2)} \equiv const, \quad c_1^\infty(x, y) \Big|_{x=x_0} = c_2^\infty(x, y) \Big|_{x=x_0} = 0. \quad (3)$$

На бічних поверхнях виділеного елемента $y = 0$, $y = L + l$ нулю дорівнюють горизонтальні складові потоку, тобто

$$\frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0, \quad \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L+l} = 0. \quad (4)$$

На межі $y = L$ задаємо умови неідеального контакту для функції концентрації у вигляді:

$$\eta_1 c_1^\infty(x, y) \Big|_{y=L} = \eta_2 c_2^\infty(x, y) \Big|_{y=L}, \quad D_1 \frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L} = D_2 \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L}, \quad (5)$$

де η_1 і η_2 ($\eta_1 \neq \eta_2$) – коефіцієнти концентраційної залежності хімічного потенціалу.

Контактно-крайову задачу (1)–(5) розв’язано шляхом інтегральних перетворень окремо в областях, що контактують, а також отримано точні аналітичні розв’язки та відповідні аналітичні вирази для функції концентрації домішкової речовини за різних типів крайових умов [10, 11].

На основі одержаних розв’язків розроблено пакет програм для побудови розподілів концентрації та потоків частинок домішкової речовини в регулярних структурах. Комп’ютерне моделювання проведено для міграції ^{137}Cs у ґрунті, монокристали якого є доломітовими. За даними робіт [6, 12] для такого типу ґрунту коефіцієнт дифузії ^{137}Cs у монокристалах є $D_1^{137\text{Cs}} = 3 \cdot 10^{-15} \text{ м}^2/\text{с}$, а в тонких каналах (швидкий шлях переміщення) коефіцієнт дифузії ^{137}Cs оцінюється $D_1^{137\text{Cs}} = (0.003 \div 0.08) D_2^{137\text{Cs}}$. Для цієї задачі прийнято $D_2^{137\text{Cs}} = 3.75 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$. Коефіцієнт конвективного перенесення залежно від кліматичних режимів змінюється в межах $0 \div 3.5 \cdot 10^{-9} \text{ м/с}$. Ми розглянули два випадки: $v = 3.7 \cdot 10^{-11} \text{ м/с}$ і $v = 3.7 \cdot 10^{-9} \text{ м/с}$. Товщина приповерхневого шару, в якому мігрує забруднювальна речовина, $x_0 = 2 \text{ м}$, а товщина тонких каналів конвективного переміщення ^{137}Cs $2L = 10^{-3} \text{ м}$.

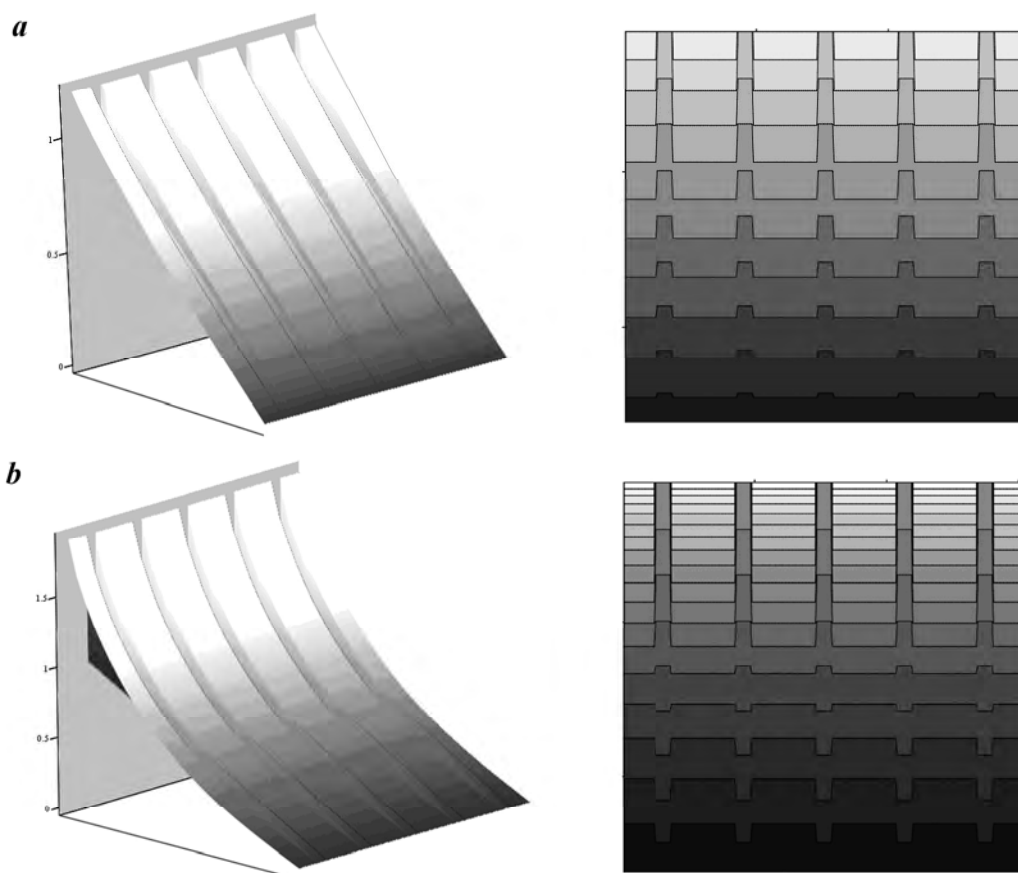


Рис. 4. Просторові розподіли функцій концентрації ^{137}Cs і рівні однакових концентрацій домішки для малих швидкостей конвективного перенесення при $c_2^{(0)} / c_1^{(0)} = 1.2$ (a) та $c_2^{(0)} / c_1^{(0)} = 1.9$ (b)

Числові розрахунки виконано у безрозмірних змінних $\xi = (k/D_1)^{1/2} x$, $\zeta = (k/D_1)^{1/2} y$, де k – коефіцієнт, який має розмірність $[c^{-1}]$ [13]. $2\Lambda = 2 \cdot 10^5$ та $2\lambda = 10^2$ – ширини тонкого каналу та монокристалу у безрозмірних змінних. Безрозмірні швидкості конвективного перенесення і відношення коефіцієнтів дифузії: $\nu = 0.0037$, $\nu = 0.37$ і $d = D_2^{137Cs} / D_1^{137Cs} = 0.08$. Відношення коефіцієнтів $\eta_1/\eta_2 = 0.4$ знайдено зі значень коефіцієнтів сорбції-десорбції ^{137}Cs [6]. Розглянуто два випадки залежності концентрації цезію-137 у структурних елементах тіла від швидкості конвективного перенесення домішки та від співвідношення поверхневих концентрацій ^{137}Cs в тонких каналах і поза ними. На рис. 4, а та 6, а відношення концентрації ^{137}Cs на поверхні області подвійного шару до концентрації ^{137}Cs на поверхні монокристалу $c_2^{(0)}/c_1^{(0)} = 1.2$. Це означає, що з поверхні в тонкі канали потрапляє 45 % поверхневого забруднення, а в мінеральні монокристали – 55 %. На рис. 4, б, 6, б наведено інший випадок: $c_2^{(0)}/c_1^{(0)} = 1.9$, що означає, що з поверхні в тонкі канали потрапляє 35 % поверхневого забруднення, а в мінеральні монокристали – 65 %.

На рис. 5 і 7 зображено усереднені за шириною сумарні концентрації (рис. 5, а; 7, а) та потоки забруднення (рис. 5, б; 7, б) для великих (крива 1) і малих (крива 2) швидкостей конвективного перенесення при $c_2^{(0)}/c_1^{(0)} = 1.2$ (рис. 5) і $c_2^{(0)}/c_1^{(0)} = 1.9$ (рис. 7). Рис. 5, б і 7, б ілюструють усереднений за шириною сумарний потік ^{137}Cs для різних товщин шару ґрунту. Так, криві 1-3 відповідають значенням сумарного потоку агресивної домішки через поверхню $x = x_*$ ($\xi = \xi_*$ у безрозмірних змінних) для $x_0 = 2, 3, 4$ м при $\nu = 0.37$. На цих графіках по осі абсцис відкладено величину ξ_*/ξ_0 , а по осі ординат – усереднений за шириною сумарний потік $\langle J(\xi_*) \rangle$.

Зазначимо, що всі рисунки ілюструють випадок інтенсивнішого змиву ^{137}Cs з поверхні ґрунту в тонкі канали. В приповерхневій області ґрунту (≈ 5 -10 см) концентрація ^{137}Cs завжди є спадною функцією (рис. 4, б; 6, б) на відміну від просторових розподілів ^{90}Sr [6], коли у разі інтенсивнішого змиву ^{90}Sr з поверхні ґрунту в тонкі канали спостерігається накопичення радіонуклідів у приповерхневому шарі.

Також зазначимо, що зі зростанням швидкості конвективного перенесення при більшому проникненні цезію-137 з поверхні ґрунту в об'єм монокристалів доломіту (рис. 6, б) відбувається накопичення радіонуклідів у тонких каналах у «нижній» частині шару ґрунту. Причому сорбційні процеси також роблять вагомий внесок.

Також зазначимо, що характер поверхневого розподілу радіонуклідів між тонкими каналами та монокристалом ґрунту суттєво впливає на сумарний потік частинок в околі нижньої границі шару (рис. 5, б; 7, б). Збільшення відносної частки поверхневої концентрації цезію-137 в об'ємі монокристалів веде до зміни усередненого потоку маси через нижню границю шару (рис. 7, б). Причому чим більша товщина цього шару, тим інтенсивніший сумарний потік через границю $x = x_0$ (крива 3, рис. 7, б). Водночас характер розподілів усередненої концентрації ^{137}Cs не змінюється (рис. 5, а і 7, а).

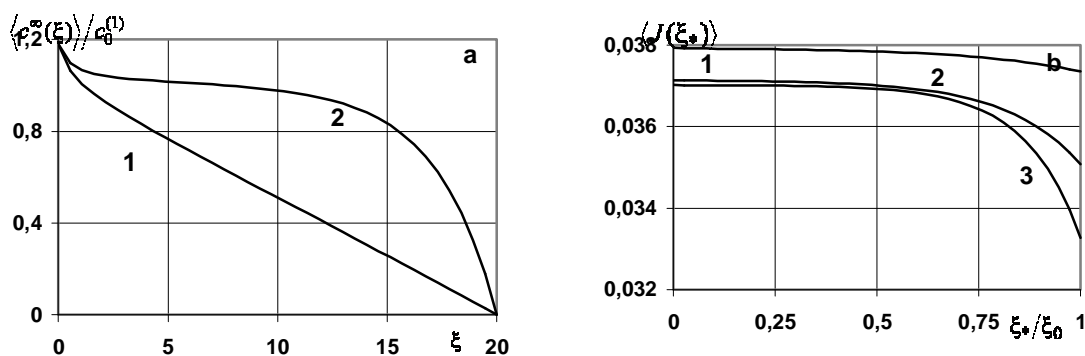


Рис. 5. Усереднені по ширині сумарні концентрації (а) і потоки (б) ^{137}Cs для $c_2^{(0)}/c_1^{(0)} = 1.2$

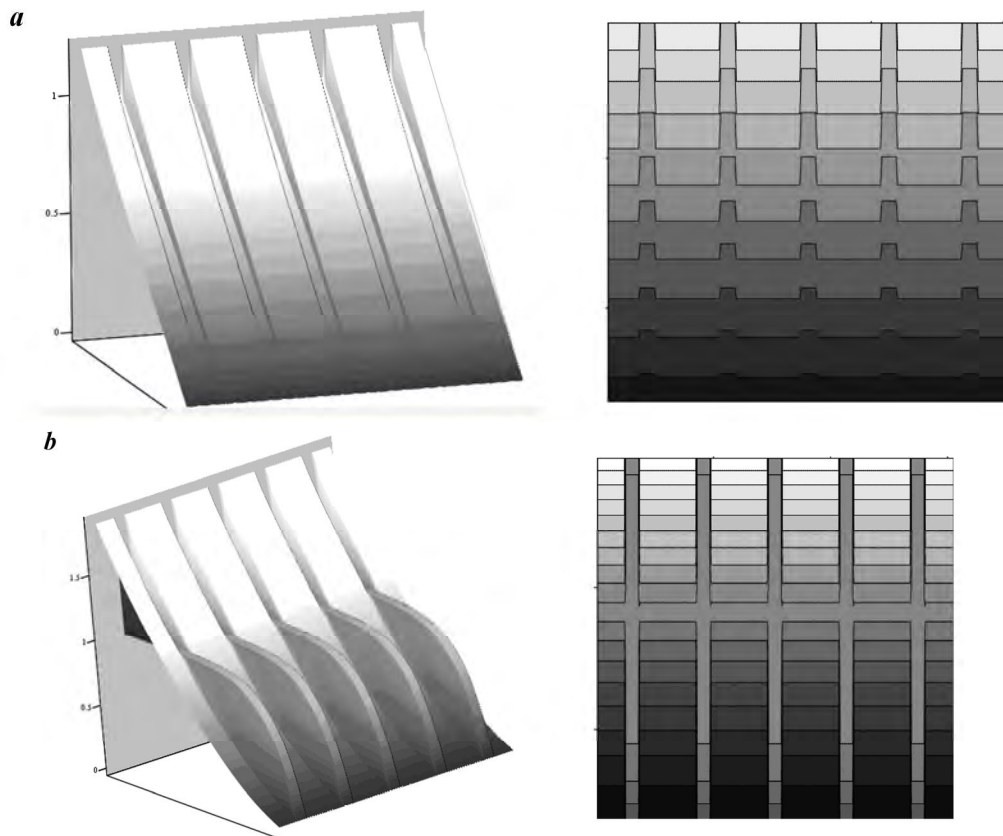


Рис. 6. Просторові розподіли концентрації ^{137}Cs і рівні однакових концентрацій домішки для великих швидкостей конвективного перенесення при $c_2^{(0)}/c_1^{(0)} = 1.2$ (a) та $c_2^{(0)}/c_1^{(0)} = 1.9$ (b)

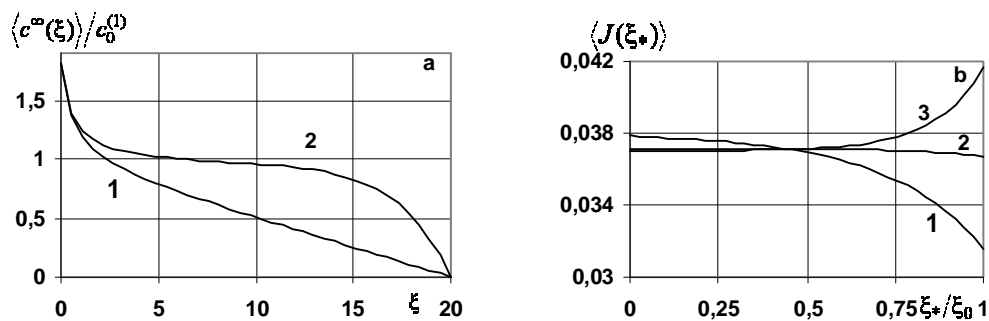


Рис. 7. Усереднені по ширині сумарні концентрації (a) і потоки (b) ^{137}Cs для $c_2^{(0)}/c_1^{(0)} = 1.9$

Висновок

Моделюючи структуру ґрунту як сукупність мінеральних монокристалів, які утворюють пористий скелет і розділені тонкими каналами швидкого переміщення забруднювальних частинок, для визначення просторового розподілу їхньої концентрації та потоків маси при поверхневому забрудненні ґрунту використано розв'язок контактної-крайової задачі дифузії домішкової речовини у регулярних структурах з урахуванням конвективного перенесення в тонких каналах. На цій основі розроблено програмне забезпечення для побудови розподілів концентрації та дифузійних потоків частинок забруднення в періодичних структурах.

Результати комп'ютерного моделювання наведено для вивчення процесів масоперенесення при приповерхневому забрудненні шару ґрунту цезієм-137. На прикладі доломітових ґрунтів проаналізовано процес проникнення елемента в кристалічні решітки мінеральних монокристалів та його конвективну дифузію тонкими каналами, процес міцного зв'язування домішки тонкодисперсною частиною ґрунту. Сорбцію цезію ґрунтовим поглинальним комплексом після його

випадіння в ґрунт здійснюють передусім великодисперсні частинки, зміщуючись потім у бік поглинання дрібнодисперсною фракцією. Інтенсивним поглинанням цезію доломітом зумовлене його широке використання для ліквідації радіаційних забруднень навколишнього середовища.

Числовий аналіз розподілів концентрації домішкових частинок в елементах тіла, що контактують, і потоків маси через нижню границю шару є перспективним для подальших досліджень, зокрема для інших типів радіонуклідів.

1. Чорнобильська катастрофа / Під ред. акад. В.Г. Бар'яхтара. – К.: Наукова думка, 1996. – 575 с. 2. Чернобыль не отпускает... (к 50-летию радиоэкологических исследований в Республике Коми). – Сыктывкар, 2009. – 120 с. 3. Електронний ресурс, режим доступу: <http://chornobyl.in.ua> 4. Електронний ресурс, режим доступу: <http://moz.gov.ua/chaes/> 5. Електронний ресурс, режим доступу: <http://ratar.jaea.go.jp/ratar/> 6. Прохоров В.М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. – М: Энергоатомиздат, 1981. – 106 с. 7. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – К.: Наук. думка, 2009. – 302 с. 8. Кашипаров В.А., Процак В.П., Перес Ж.-М., Ахмадаш Н., Йоценко В.И., Зварич С.И., Пазухин Э.М. Кинетика растворения чернобыльских топливных частиц. I. Растворение топливных частиц разного генезиса в модельных экспериментах // Радиохимия. – 2000. – Т. 42, № 6. – С. 533–541. 9. Фрид Ж. Загрязнение подземных вод. – М: Недра, 1981. – 304 с. 10. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Дмитрук В.А. Математичне моделювання стаціонарних процесів конвективно-дифузійного масопереносу у бінарних періодичних структурах // Доповіді НАН України. – 2011. – № 7. – С. 46–51. 11. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Дмитрук В.А. Моделювання граничних випадків контактної крайової задачі стаціонарної конвективної дифузії в періодичних структурах // Моделювання та інформаційні технології. – 2010. – Вип. 58. – С. 242–253. 12. Радиоактивное загрязнение природных сред при подземных ядерных взрывах и методы его прогнозирования / Под ред. Ю.А. Израэля. – Л.: Гидрометеиздат, 1970. – 67 с. 13. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. – Львів: СПОЛОМ, 2003. – 128 с.

УДК 66.002.3:541.12

Н.Ю. Голець, Ю.О. Малик, О.Г. Чайка

Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра прикладної екології та збалансованого природокористування

ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ОСНОВНИХ ЧИННИКІВ НА ФІЛЬТРУВАЛЬНІ ВЛАСТИВОСТІ ГЛИНИСТИХ МАТЕРІАЛІВ ПРОТИФІЛЬТРАЦІЙНОГО ЕКРАНА ПОЛІГОНА ТПВ

© Голець Н.Ю., Малик Ю.О., Чайка О.Г., 2012

Проаналізовано результати досліджень впливу різних чинників на фільтрувальні властивості природних мінералів, що дасть можливість їх застосовувати як проти-фільтраційний екран на полігонах ТПВ.

Ключові слова: фільтрування, бентоніт, палігарскіт, стічна вода.

Results of investigations of the influence of various factors on the filtration properties of natural minerals that will give possibility of their application in a role of screens of landfill leachate.

Key words : filtration, bentonite, paliharskit, effluent water.

Постановка проблеми і її зв'язок з важливими науковими завданнями

Екологічні дослідження, проведені в останні десятиріччя в багатьох країнах світу, показали, що руйнівна дія антропогенних чинників на навколишнє середовище, яка постійно зростає, привела його на межу кризи. Проблема охорони навколишнього середовища є комплексною і має глобальний характер.