

Министерство образования и науки Украины
Национальный горный университет

Д.В. Рудаков

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССОПЕРЕНОСА РАДИОНУКЛИДОВ В
ПОТОКАХ ПОДЗЕМНЫХ ВОД**

Монография

Днепропетровск
НГУ
2010

УДК 556.338:628.4.047
ББК 26.35:30.69
Р 83

Рекомендовано Ученым Советом НГУ (протокол № 5 от 01.06.2010).

Рецензенты:

О.Г. Гоман, доктор технических наук, профессор, зав. кафедрой аэрогидромеханики Днепропетровского национального университета;

Е.А. Яковлев, доктор технических наук, главный научный сотрудник отдела информационной безопасности Института проблем национальной безопасности СНБО Украины.

Р 83 Рудаков Д.В. Моделирование массопереноса радионуклидов в потоках подземных вод: Монография. – Д.: Герда, 2010. – 160 с.

УДК 556.338:628.4.047
ББК 26.35:30.69

ISBN 978-966-8856-40-2

© Рудаков, 2010

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	5
Перечень основных обозначений.....	7
1. Современные подходы к моделированию миграции радионуклидов в подземных водах.....	8
2. Разработка аналитических моделей массопереноса радионуклидов.....	20
2.1. Постановка основных краевых задач массопереноса в геофильтрационных потоках.....	20
2.2. Моделирование переноса компонент цепочки распада.....	30
2.3. Учет размеров источников и типов границ в моделях миграции.....	37
2.3.1 Расщепление уравнения массопереноса.....	37
2.3.2 Аналитические модели массопереноса в двумерных областях фильтрации.....	42
2.3.3 Аналитические модели массопереноса в трехмерных областях фильтрации.....	47
2.3.4 Расчет массопотока через границу области фильтрации.....	51
2.4. Учет неоднородностей при использовании аналитических моделей.....	53
3. Исследование особенностей массопереноса радионуклидов.....	60
3.1. Оценка точности вычислительной реализации аналитических решений.....	60
3.2. Влияние миграционных параметров на формирование зон радиоактивного загрязнения подземных вод.....	65
3.3. Динамика поступления радионуклидов в поверхностные водоемы.....	76
3.4. Учет пространственного характера миграции при выполнении прогнозов загрязнения подземных вод.....	86
3.5. Прогноз миграции радионуклидов в подземных водах зоны ЧАЭС.....	98
3.6. Прогнозирование миграции радионуклидов в зоне влияния хвостохранилища отходов переработки урановых руд.....	106
3.7. Влияние погрешностей исходных параметров на точность прогнозирования.....	115

4. Моделирование массопереноса радионуклидов методом Монте-Карло.....	120
4.1. Разработка алгоритма случайных блужданий для решения уравнения массопереноса.....	120
4.2. Исследование точности алгоритма моделирования.....	130
4.3. Прогноз и контроль миграции трития из хранилища радиоактивных отходов.....	139
Заключение.....	148
Перечень ссылок.....	149

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в Украине, как и во многих странах с развитой атомной энергетикой остро стоит проблема загрязнения окружающей среды радиоактивными веществами. В связи с наметившимся в последние годы ростом числа АЭС в мире происходит быстрое накопление радиоактивных отходов (РАО). На уранодобывающих предприятиях накоплены миллиарды тонн отходов добычи и переработки радиоактивных руд. Кроме них, требуют переработки и захоронения более 200 тыс. тонн высокоактивных РАО в виде отработанного ядерного топлива, ежегодно к ним добавляется еще 10-12 тыс. тонн; при этом Украина занимает четвертое место в Европе по объемам таких отходов.

Особая значимость этой темы для Украины обусловлена последствиями чернобыльской катастрофы и большой ролью ядерной энергетики в топливно-энергетическом комплексе. Поэтому надежная изоляция РАО в геологической среде является одной из важнейших экологотехнических проблем, решение которой предполагает предотвращение, локализацию или ликвидацию радиоактивного загрязнения подземной гидросферы, для которого характерны большая длительность, сложность контроля и трудноустранимость.

Проекты захоронения РАО должны быть обоснованы с точки зрения минимизации экологического ущерба в результате возможного загрязнения подземных вод и связанных с ними поверхностных водоемов и водотоков. В зонах существующего радиоактивного загрязнения необходим правильный выбор параметров защитных мероприятий, направленных на уменьшение степени такого загрязнения до безопасного уровня. Многие из существующих захоронений РАО нуждаются в коренной реконструкции с учетом современных норм радиационной безопасности. При этом известные методы прогноза и контроля миграции в подземных водах, включая средства моделирования, с помощью которых обосновываются защитные мероприятия, далеко не в полной мере соответствуют специфике массопереноса радионуклидов в подземных водах и сложности решаемых задач.

В монографии представлены результаты исследований, выполненных с помощью аналитических и имитационно-стохастических методов моделирования массопереноса, возможности которых недостаточно используются на практике.

Основное внимание в разработанных аналитических моделях уделено адекватному учету тех миграционных и технологических пара-

метров, которые важны для экологически безопасной эксплуатации хранилищ РАО. К ним относится форма и размер хранилищ, их расположение в фильтрационном потоке, переменная во времени и в пространстве интенсивность поступления веществ в поровый раствор, состав смеси веществ, в которой присутствуют материнские и дочерние компоненты цепочки распада, неоднородность области фильтрации и различные типы ее границ.

Эффективная вычислительная реализация аналитических моделей позволяет использовать их как непосредственно для прогнозирования, так и в качестве эталонов точности применяемых на практике численных алгоритмов. Аналитические модели дают возможность систематически и с минимальной вычислительной погрешностью исследовать динамику зон распространения радионуклидов, их поступление в поверхностные водоемы и водотоки, оконтуривать зоны в области миграции с различной чувствительностью рассчитываемой концентрации к ошибкам задаваемых при расчете параметров. Перечисленные задачи входят в число приоритетных при проведении мониторинга подземных вод в зонах влияния радиационно-опасных объектов.

Использованный в монографии метод статистических испытаний (метод Монте-Карло) позволяет количественно учесть влияние неопределенности при изменении параметров проницаемости и сорбции в областях фильтрации сложной структуры на результаты расчета, тем самым дать более адекватный реальности вероятностный прогноз. Кроме того, возможность локального определения концентрации методом Монте-Карло является его преимуществом по сравнению с конечно-разностным или конечно-элементным методом при сопоставлении результатов моделирования с данными мониторинга в контрольных точках.

Разработанные модели и методики их применения могут быть использованы при проведении радиозоологического мониторинга на предприятиях горной промышленности по добыче радиоактивного сырья, предприятиях и организациях, выполняющих работы по подземному захоронению РАО. В монографии приведены примеры применения моделей для прогноза миграции радионуклидов на объектах в зоне ЧАЭС, в зоне влияния небольшого хранилища РАО и крупного хвостохранилища отходов переработки урановых руд.

Автор выражает признательность доктору технических наук, профессору Садовенко И.А. за ценные советы и замечания при подготовке текста монографии.

ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

A – активность радионуклида (Бк); безразмерная функция распределения радионуклида по площади (в объеме);

C – концентрация радионуклидов в поровом растворе (Бк/м³);

D_x, D_y, D_z – коэффициенты конвективной диффузии (гидродисперсии) вдоль осей координат Ox, Oy, Oz (м²/сут);

G – функция источника выделения массы вещества, размерность которой зависит от размерности краевой задачи;

H – фильтрационный напор (м),

I – градиент фильтрационного напора (б/р);

K – коэффициент фильтрации (м/сут);

K_d – коэффициент распределения вещества между твердой и жидкой фазами в водонасыщенной породе (л/мг);

K_{pv} – константа полувыведения радионуклида из твердых частиц в растворенное состояние (сут⁻¹);

L, l – длина (м);

m_0 – мощность водоносного горизонта (м);

N – концентрация радионуклидов в твердой фазе (Бк/м³);

n – пористость (б/р);

n_e – эффективная пористость (б/р);

P – вероятность (б/р);

Q – объемный расход (м³/сут);

q – интенсивность поступления радионуклидов в фильтрационный поток (Бк/(м²сут) или Бк/(м³сут) для двух- и трехмерных областей соответственно);

$T_{1/2}$ – период полураспада радионуклидов (сут);

t – время (сут);

\bar{V} – скорость фильтрации (м/сут);

x, y, z – декартовы координаты (м);

δ_L, δ_T – параметры дисперсии в горных породах (м);

Γ – граница области фильтрации

λ – постоянная радиоактивного распада (сут⁻¹);

Ω – область поступления веществ в фильтрационный поток;

Ψ – поток вещества в водонасыщенных породах (Бк/(м²сут)).

1. СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К МОДЕЛИРОВАНИЮ МИГРАЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ В ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ

Прогноз и контроль загрязнения подземных вод являются неотъемлемой частью мониторинга окружающей среды в зонах влияния объектов радиационной опасности. В задачи геологического мониторинга подземной гидросферы входят [20, 35]: определение показателей состояния подземных вод, наблюдение за их режимом и составом при техногенном загрязнении, прогнозирование возможных изменений наблюдаемых и контролируемых параметров, организации мероприятий профилактического и активного характера на участках существующего загрязнения.

Комплексное решение этих задач обязательно для: а) обоснования места размещения объектов, представляющих радиационную опасность (хвостохранилищ, захоронений РАО); б) экологически безопасного ведения горных работ при их создании; в) минимизации экологического ущерба, обусловленного существующим или гипотетическим радиоактивным загрязнением подземных и связанных с ними поверхностных вод при эксплуатации этих объектов. Мониторинг в условиях систематического поступления радиоактивных веществ (РВ) в геологическую среду нацелен на определение путей и интенсивности их миграции в водоносные горизонты, ореолов рассеяния в подземных водах, а также последующего поступления этих веществ в поверхностные водоемы и водотоки.

При организации системы наблюдений на радиационно-опасном объекте выделяют «ближнюю» и «дальнюю» зоны [29], которые в совокупности представляют геотехническую систему, внедренную в геологическую среду.

К «ближней» зоне относится часть породного массива, содержащая инженерные барьеры, которая непосредственно подвергается радиационному, тепловому и физико-химическому воздействию отходов и имеет наибольшие изменения в структуре массива и горных пород. Чем выше экологическая опасность отходов, тем более значимой становится роль «ближней» зоны как мультибарьерной системы на пути распространения РВ в подземных водах. К инженерным барьерам относят [76]: 1) устойчивость физико-химической формы отходов; 2) коррозионную стойкость контейнеров и хранилищ отходов; 3) низкую проницаемость и высокую сорбционную емкость буферных материалов.

«Дальняя» зона является наиболее важным барьером на пути распространения РВ от источника загрязнения до экологически значимых объектов. Защитные свойства «дальней» зоны как естественного барьера определяются характеристиками гидрогеохимических процессов [76]: 1) скоростью движения подземных вод; 2) временем переноса подземных вод до ближайшего потребителя, в течение которого активность переносимых радионуклидов снижается; 3) задержкой мигрирующих РВ в горных породах вследствие сорбционных процессов. Задачи мониторинга в «дальней» зоне заключаются в определении параметров миграции в водоносных пластах, контроле содержания РВ в подземных водах, прогнозе миграции радионуклидов в соответствии с различными сценариями техногенного воздействия, выборе защитных мероприятий и обосновании их параметров в случае превышения допустимых концентраций РВ в подземных водах.

К методам контроля в зоне влияния источников радиоактивного загрязнения относятся наблюдения за уровнем активности в подземных и поверхностных водах, почвах, атмосфере, объектах биосферы [38, 67]. Основную информацию о радиоактивном загрязнении подземных вод дают результаты режимных наблюдений на основе сети контрольных скважин и пунктов радиометрического контроля прилегающих водоемов и водотоков.

Анализ системы контроля радиационной обстановки в существующих зонах загрязнения показывает, что имеющаяся сеть контрольных скважин не имеет надлежащего обоснования с точки зрения особенностей миграции в подземных водах, а известные рекомендации на этот счет [16, 35, 36] носят общий характер, что требует их адаптации к условиям конкретных объектов.

Контроль загрязнения подземных вод в широком смысле предполагает проведение мероприятий как предупредительного, так и активного характера. Среди предупредительных мероприятий следует отметить [29, 67]: размещение потенциальных источников радиоактивного загрязнения вдали от экологически значимых объектов природной среды в геологических формациях, сложенных породами с низкими фильтрационными свойствами, высокой сорбционной емкостью и т.д. При этом требования к участкам для геологических хранилищ РАО и размещения других объектов радиационной опасности формулируются в большинстве стран пока только в общем виде.

Основой долговременной надежной изоляции высокоактивных РАО сейчас признана мультибарьерная концепция, которая предполагает

комплексное использование искусственных и естественных барьеров на пути миграции радионуклидов. Проекты захоронения обязательно включают прогнозные оценки возможного распространения РВ в геологической среде, которые базируются на тщательном анализе напорно-безнапорной фильтрации в неоднородной толще пород, нестационарного трехмерного массопереноса, сопровождаемого сорбцией, распадом, образованием новых соединений и т. п. Это подтверждают примеры прогноза миграции радионуклидов в подземных водах в районе опытной станции реактора в Южном Айдахо (США) [71], хранилищ РАО вблизи озера Онтарио [106], потенциальных хранилища отходов вблизи горы Юкка (Невада, США) [129].

Среди мероприятий активного характера следует выделить [16, 36, 38, 72]: защитный дренаж с раздельной откачкой загрязненных и кондиционных вод, защитный барраж с закачкой через скважины чистой воды перед движущимся фронтом веществ, откачку загрязненных вод скважинами (локализация или перехват «пятна» загрязнения), изоляцию очагов загрязнения водонепроницаемыми завесами (противофильтрационными экранами), консервацию или ликвидацию объектов – источников поступления РВ в подземные воды. Выбор параметров этих и других мероприятий часто основывается только на расчетах скоростей движения подземных вод и не учитывает должным образом особенности массопереноса, что ограничивает эффективность защиты. Для адекватной оценки уровня ожидаемого загрязнения подземных вод и оптимального выбора защитных мероприятий необходим прогноз миграции РВ, который может быть выполнен балансовыми, статистическими методами или с помощью моделирования.

Балансовые методы позволяют дать обобщенные прогнозные оценки времени миграции через породы зоны аэрации с последующим достижением веществом уровня грунтовых вод [77], размеров зоны радиоактивного загрязнения и времени начала поступления РВ в нижележащие водоносные горизонты [6]. Балансовый подход использован в модели радиоактивного загрязнения водоносного пласта компонентами цепочки распада [127]. Балансовые расчеты необходимы на предварительном этапе разработки системы мониторинга для получения ориентировочных оценок. Однако для детального качественного и количественного описания миграции с учетом пространственно-временных изменений необходимо использовать более совершенные методы.

Применение статистических методов обработки результатов экспериментальных исследований, в том числе тренд-гармонического анали-

за [78], позволяет выявить некоторые закономерности процесса в зоне конкретного объекта: сезонный характер изменения концентрации, влияние нарушений в структуре горных пород на динамику миграции РВ и т.д. Вместе с тем эти методы не учитывают физико-химический механизм процесса и не дают возможность выполнять долговременные прогнозы.

В связи с интенсивным развитием вычислительной техники и расширением ее возможностей в настоящее время основным методом прогноза миграции радионуклидов в подземных водах стало математическое моделирование, опирающееся на результаты полевых и лабораторных исследований. С помощью моделирования можно прогнозировать уровень и масштаб радиоактивного загрязнения подземных и поверхностных вод при различных технологических режимах эксплуатации хранилищ РАО. Тем самым осуществляется возможность прогноза и контроля состояния геологической среды, а также управления качеством природных вод с точки зрения экологической и экономической целесообразности. Корректность и достоверность полученных результатов обеспечивается взаимосвязью результатов моделирования и данных мониторинга. Этот принцип был реализован, например, в рамках постоянно действующих математических моделей в гидрогеологии [40].

В настоящее время для математического описания массопереноса в подземных водах преимущественно используются модели конвективной диффузии (гидродисперсии) [8, 10, 13, 33, 34, 71, 109], поршневого вытеснения [6, 32, 35] и чисто диффузионная модель [46, 89, 90, 119], основанные на представлениях сплошной среды. Одновременно развивается подход, основанный на модели пористо-трещиноватой среды [4], а также сред со стохастической проницаемостью различного масштаба [91, 97].

Согласно поршневой модели, существует четкая граница раздела чистой и вытесняющей ее загрязненной жидкости, влияние дисперсии пренебрежимо мало, а в поровом сечении все частицы жидкости движутся с одинаковой скоростью. Фронт концентрации полностью определяется по гидродинамической сетке положением границы раздела жидкостей. Поршневая модель совместно с аппаратом теории аналитических функций использовалась для расчета переноса веществ вдоль линий тока фильтрационного потока в слоях переменной толщины и проводимости [42]. Следует учитывать ограниченную применимость данной модели ввиду пренебрежения фактором дисперсии; хотя ее ис-

пользование целесообразно в качестве элемента расчетной схемы в некоторых случаях, например, при миграции в среде с двойной пористостью.

Диффузионная модель, основанная на законе Фика и не учитывающая фактор конвекции, применима в ряде случаев, представляющих практический интерес. В частности, она использовалась в [46] при исследовании миграции радионуклидов в верхнем почвенном слое и для описания процессов проникновения РВ в окружающие породы при разгерметизации контейнеров, содержащих радиоактивные отходы [89, 90, 119].

Массоперенос РВ в водоносных горизонтах, приуроченных к осадочным породам, адекватно описывается моделью конвективной диффузии (гидродисперсии), учитывающей основные факторы переноса веществ в водонасыщенных пористых средах. При решении практических задач используются следующие способы схематизации и упрощения исходной модели с учетом конкретных природных и техногенных условий [8, 10, 12, 13, 14, 32, 35, 36, 71]: 1) понижение размерности области фильтрации; 2) осреднение миграционных параметров в рамках представлений квазиоднородной среды; 3) выделение характерных линий тока фильтрационного потока для решения одномерных миграционных задач; 4) представление верхней части толщи водоносных пород в виде системы водоносных горизонтов с различными физико-химическими свойствами и полями скоростей, разделенных слабопроницаемыми слоями; 5) упрощение формы области фильтрации, позволяющее в ряде случаев применять аналитические зависимости, полученные для канонических областей; 6) учет экспериментально полученных зависимостей для свойств горных пород в расчетных соотношениях; 7) замена источников загрязнения конечных размеров точечными; 8) допущение об изотермическом характере процесса; 9) пренебрежение кинетикой сорбции и нелинейным характером массообмена.

На основе математической модели, конкретизированной на этапе схематизации, формулируются краевые задачи массопереноса РВ в потоках подземных вод, которые решаются с помощью аналитических, численных, стохастических методов или их комбинации.

Для получения точных решений уравнения массопереноса используются преимущественно методы источников, интегральных преобразований и разделения переменных [33, 43, 66, 70]. Применение приближенных аналитических методов (вариационных, суммарных пред-

ставлений, малого параметра и т.д.) целесообразно тогда, когда получить точные решения затруднительно или невозможно, например, в задачах с переменными в пространстве компонентами скорости фильтрации [14, 30], с нелинейностью или с подвижной границей [13]. Теоретическая и практическая ценность точных решений состоит в том, что они не содержат чисто математических погрешностей и могут использоваться для тестирования численных алгоритмов.

Среди точных решений, полученных в рамках модели гидродисперсии, подавляющее большинство относится к одномерным областям фильтрации. С помощью одномерных решений моделируется как вертикальная миграция, так и перенос веществ в горизонтальном направлении вдоль линий тока поля скоростей фильтрации. Большинство результатов получено для постоянных параметров среды, однако известны решения уравнения массопереноса при зависимости скорости фильтрации от времени [13], а также коэффициента диффузии от скорости [13, 101], координат [134] и времени [82]. В качестве справочной литературы по точным решениям уравнения массопереноса можно использовать [33, 45].

При моделировании одномерной миграции обычно используется следующая схема. На входе в полуограниченную область поддерживается постоянная или изменяющаяся во времени по определенному закону концентрация веществ при условиях первого [10, 115] или третьего рода [3, 48, 112]. Начальное распределение концентрации [48] или внутренний источник [112] задаются ступенчатыми или кусочно-линейными функциями. В полученных расчетных зависимостях обычно не учитывается механизм потока вещества через выходную границу области фильтрации.

Двумерные задачи миграции, для которых известны аналитические решения, рассматривались в областях с внешними и внутренними источниками вещества. Согласно первой схеме [86, 103] задается источник конечных размеров в виде отрезка на входной границе области фильтрации. Во втором случае с помощью ступенчатой функции задается кусочно-постоянное начальное распределение концентрации, отображающее мгновенный источник в пласте-полуплоскости [12, 111] или постоянно действующие источники в пласте-плоскости [51].

В двумерной постановке было получено решение задачи о распространении РВ в радиальном потоке при закачке жидких РАО в поглощающую скважину [104]; при этом использовался метод разложения в ряд по малому параметру. В известных решениях двумерных задач не

рассматривалась миграция через выходную границу и параметры внутренних источников, влияние распада, за исключением схем точечного источника, как правило, не учитывалось. В решении задачи переноса компонент цепочки распада [121], в отличие от представленной в разделе 2.2 модели, не отражен важный для практики фактор различия параметров сорбции материнского и дочернего веществ.

Пространственные задачи массопереноса в пористых средах наименее исследованы аналитическими методами, а известные зависимости относятся к простейшим схемам. Так, в схеме с точечным источником, расположенным в неограниченном в плане водоносном горизонте конечной мощности [35], не учтена миграция через кровлю и подошву, которые рассматриваются как непроницаемые границы. Аналитическая модель пространственного массопереноса [123] описывает трехмерную дисперсию, сорбцию и радиоактивный распад в однонаправленном потоке при наличии прямоугольного источника вещества на границе области, однако вычислительная реализация модели затруднена ввиду громоздкости расчетных формул.

Аналитические методы применялись также при моделировании одномерного переноса компонент цепочки распада [107], миграции РВ с коллоидными фракциями [88] и для уточнения параметров моделей по результатам лабораторных исследований [94].

В силу ограниченности известных к настоящему времени аналитических решений на практике наибольшее распространение получили численные методы. Чаще всего применяются методы конечных разностей (МКР) и конечных элементов (МКЭ); используются также метод статистических испытаний (метод Монте-Карло), метод граничных элементов (МГЭ) и аналитических элементов (МАЭ). Для нестационарных задач иногда оказывается эффективным сочетание разных методов, например МКЭ и МКР.

Среди многочисленных работ по основам метода конечных разностей и его применению для решения задач гидродинамики и тепло-массопереноса следует отметить [49, 64], где освещены вопросы выбора разностных схем и их устойчивости, а также монографии и публикации прикладной направленности [24, 34, 37, 71, 97, 109, 129]. В [65] методом конечных разностей моделировалась вертикальная миграция веществ в ненасыщенных грунтах с учетом нелинейности влагопереноса, а в [20] – миграция ^{90}Sr в подземных водах зоны ЧАЭС и его поступление в р. Припять. В [26, 63] указанным методом решались задачи переноса примеси в плановом потоке в условиях защитного барража.

Универсальность метода сеток позволяет моделировать нелинейный массообмен, сопряженную фильтрацию и массоперенос в областях неправильной формы с разными типами границ. В то же время использование МКР связано с погрешностями, возникающими при аппроксимации дифференциальных уравнений и граничных условий, большими требованиями к вычислительным ресурсам компьютеров для достижения высокой точности, особенно для пространственных нестационарных задач. Вычислительные проблемы возникают также при конечно-разностном моделировании массопереноса в условиях высокой конвекции (больших числах Пекле), что характерно для трещиноватых пород.

Наряду с методами сеток для моделирования массопереноса в подземных водах применяются методы, основанные на вариационном подходе. Среди них большое распространение получил метод конечных элементов с использованием схемы Галеркина [93, 120]. Использование конечных элементов различной формы, включая криволинейную, дает возможность более точно, по сравнению с МКР, аппроксимировать контуры области массопереноса, форму источника поступления вещества, граничные условия. На основе МКЭ и его модификаций разработаны пакеты прикладных программ [93, 106, 108, 136], используемые для прогнозирования миграции в подземных водах.

Метод граничных элементов сохраняет большинство сильных сторон, присущих МКЭ, и при этом позволяет снизить порядок матрицы системы решаемых уравнений, что существенно уменьшает объем памяти ЭВМ и количество необходимых вычислений. Однако опыт практического применения МГЭ [98, 126, 135] показывает его ограничения при отображении неоднородности области фильтрации, что связано с необходимостью использования фундаментального решения уравнения переноса с постоянными коэффициентами.

Для моделирования фильтрации и массопереноса в последнее время предлагается использовать метод аналитических элементов (МАЭ) [125], отдельные аспекты применения которого представлены в [105, 114]. Данный метод не является чисто аналитическим или численным. Согласно МАЭ, поток подземных вод моделируется наложением фильтрационных полей, создаваемых отдельными «элементами», в качестве которых выступают линейные и точечные источники и стоки, диполи и т. д. Преимуществом метода, по сравнению с МКР и МКЭ, является отсутствие искусственной дискретизации области при достаточно точной аппроксимации границ. Метод применялся для моделирования региональных фильтрационных течений [114], течения подземных вод в

неоднородном водоносном горизонте [105], нестационарной фильтрации [99] и для безнапорного течения в условиях сезонных колебаний инфильтрации [80]. Однако до сих пор ряд теоретических аспектов и вопросов практического применения МАЭ требуют существенной доработки.

Общие вопросы применения метода Монте-Карло для решения различных уравнений математической физики и его вычислительной реализации отражены в [15, 22, 23, 68]. Метод использовался для моделирования фильтрации и массопереноса в пористых средах [50, 75, 79, 100, 102, 110, 129, 131], в том числе совместно с методом конечных разностей [32].

В основу метода применительно к задачам массопереноса положен процесс случайного блуждания «меченой» частицы по алгоритмически определяемой траектории с реализацией «штрафов» в точках области и на ее границе. Алгоритм предусматривает многократное построение случайных траекторий частиц и полей проницаемости с последующим статистическим анализом. Преимущества метода проявляются при моделировании трехмерного массопереноса в областях сложной формы с переменными параметрами среды. Метод статистических испытаний, в отличие от МКР и МКЭ, дает возможность определения концентрации вещества в отдельно взятой точке области независимо от других точек, что представляет интерес при сопоставлении результатов расчета и данных мониторинга в пунктах наблюдений (скважинах, шурфах и т.д.).

Синтезом стохастических и численных методов стало совместное применение теории случайных процессов и феноменологических моделей, предполагающее многократное построение случайных полей – аналогов полей проницаемости и других характеристик водоносных горизонтов. Данный путь наиболее перспективен, хотя требует существенной теоретической доработки и больших затрат вычислительных ресурсов.

Подобная методика использовалась для оценки инфильтрации в зону предполагаемого захоронения высокоактивных РАО в штате Невада (США) [129]. Модель ненасыщенного потока была протестирована на реальном объекте в неоднородном массиве, структура которого представлялась гауссовым случайным полем. Аналогичный подход [128] использовался для оценки зон перехвата загрязненных подземных вод скважинами в условиях неполной информации о проницаемости водоносных горизонтов.

Практическую ценность в рамках такого подхода имеют алгоритмы и программные средства отображения сложных геологических структур и воспроизведения условий миграции в многослойных водоносных комплексах [83, 87, 132]. Как правило, используются различные модификации известной модели с двойной пористостью [4].

Определенные перспективы для адекватного описания фильтрации и массопереноса в неоднородных водоносных горизонтах дает математический аппарат теории фракталов, использованный в [131] для описания вытеснения разнородных и несмешивающихся жидкостей.

Из других численных методов, применявшихся для моделирования массопереноса РВ в подземных водах, следует отметить методы характеристик [95] и прямых [84], представляющие интерес в частных случаях.

Анализ современного этапа развития математического моделирования фильтрации и массопереноса позволяет выделить следующие тенденции.

- теоретической основой описания массопереноса в фильтрационных потоках де-факто стала модель гидродинамической дисперсии (конвективной диффузии), параллельно с ней развиваются модели переноса в среде с двойной пористостью;

- ускоренное развитие вычислительной техники, в частности, многопроцессорных ЭВМ, позволяет создавать и применять на практике трехмерные нестационарные модели сложных гидрогеологических объектов;

- растет интерес к моделям, которые нацелены на адекватное отображение многоуровневой структуры горных пород;

- одновременно с уровнем сложности возрастает количество моделей, расширяется перечень рассчитываемых параметров, увеличивается степень детализации природных и техногенно измененных объектов;

- расширяется спектр применяемых подходов, что вызывается разнообразием практических задач, многообразием природных и техногенных условий и развитием методов прикладной математики;

- увеличивается объем и возрастает качество экспериментальных исследований, что позволяет, используя аналогии, более достоверно идентифицировать модели миграции даже при ограниченности данных об объекте;

- усиливается внимание к методам теории случайных процессов, используемых для отображения стохастического характера неоднород-

ности массива горных пород, что формализуется в виде случайных полей проницаемости, трещиноватости и т. д.

– в научных исследованиях во все больше степени используются сертифицированные программные продукты с высоким уровнем визуализации, разработанные для решения практических задач (MODFLOW, FEFLOW, GFLOW);

В отношении аналитических методов могут быть сделаны следующие выводы:

– подавляющее большинство аналитических решений уравнения гидродисперсии получено для одномерных расчетных схем миграции вдоль линии тока;

– с помощью известных формул затруднительно учесть сложную форму и переменную во времени интенсивность источников поступления РВ в подземные воды;

– следствием развития и совершенствования аналитических методов является расширение спектра задач, для которых уже найдены точные или приближенные решения, а ранее использовались численные алгоритмы;

– отдельные результаты появляются для специальных случаев, в частности, для описания массопереноса в трещиноватых породах и областях фильтрации со слоистой анизотропией, миграции многокомпонентных смесей.

Анализ развития численных методов моделирования массопереноса в подземных водах (преимущественно МКР и МКЭ) позволяет сделать следующие выводы относительно развития расчетных схем и алгоритмов:

– оптимизируются схемы аппроксимации и итерационные циклы [96, 116];

– совершенствуются методики тестирования и сравнения результатов моделирования с данными мониторинга;

– разрабатываются способы локального сгущения сетки для более точного отображения особенностей фильтрационных течений,

– разрабатываются алгоритмы расчета многофазных течений и миграции в трещиноватых породах;

– используются специальные системы координат, например, «эквипотенциали – линии тока».

Трудности и проблемы, возникающие при использовании аналитических и численных методов, связаны во многом со сложной структурой пористой и трещиноватой сред, извилистостью путей движения

жидкости и веществ, особенно в зоне неполного насыщения. Важность исследований по этим вопросам имеет большое практическое значение, поскольку захоронения отходов на поверхности располагаются над ненасыщенными породами или перекрываются ими сверху, а глубокие захоронения высокоактивных РАО на больших глубинах в массивах кристаллических пород могут попадать в зону фильтрации по трещинам. Содержательный методологический обзор работ по этим вопросам представлен в [83], где отмечается неоднозначность трактовки экспериментальных данных с позиций различных математических моделей. Особенно это касается параметров массообмена между трещинами и пористыми блоками [113].

Особенностью задач миграции в подземных водах является недостаток данных о параметрах исследуемых объектов. Это, с одной стороны, усложняет моделирование, с другой – дает простор альтернативным подходам, среди которых можно выбрать целесообразный и наиболее эффективный в конкретной ситуации. Применение сертифицированных программ не дает гарантии достоверного прогноза. Практика моделирования свидетельствует, что в условиях нехватки исходной информации и невысокой точности параметров преимущества сложных моделей становятся менее ощутимыми. С другой стороны, упрощенные расчетные схемы нельзя рассматривать как альтернативу хорошо разработанным численным и аналитическим методам ввиду сложности условий миграции, которые невозможно отобразить постоянными коэффициентами.

Одним из возможных путей решения этой проблемы может стать подход, предложенный в разделе 2.4. Он предусматривает усреднение миграционных параметров в течение отдельных промежутков времени на ряде участков области фильтрации и проведение дальнейших расчетов на основе моделей с постоянными параметрами. Общая миграционная модель строится на основе простых моделей, связанных между собой специальным образом, что позволяет выполнять достоверные прогнозы без использования специального программного обеспечения.

2. РАЗРАБОТКА АНАЛИТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ МАССОПЕРЕНОСА РАДИОНУКЛИДОВ

2.1. Постановка основных краевых задач массопереноса в геофильтрационных потоках

На современном уровне представлений о механизме переноса радионуклидов в потоках подземных вод адекватное описание данного процесса возможно с помощью системы уравнений, составленной на основании соотношений модели гидродисперсии [8, 10, 13, 71] с учетом в них распада по цепочке с образованием дочерних компонент [11, 19]:

1) уравнения движения и баланса массы веществ

$$\psi_{ij} = v_j C_j - D_i \frac{\partial C_j}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3, j = 1, \dots, s; \quad \sum_{i=1}^3 \frac{\partial \psi_{ij}}{\partial x_i} + \frac{\partial N_j}{\partial t} = -\frac{\partial (nC_j)}{\partial t}; \quad (2.1)$$

2) уравнения радиоактивного распада в жидкой и твердой фазах

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1}{\partial t} &= -\lambda_1 C_1, & \frac{\partial C_j}{\partial t} &= -\lambda_j C_j + \lambda_{j-1} C_{j-1}; \\ \frac{\partial N_1}{\partial t} &= -\lambda_1 N_1, & \frac{\partial N_j}{\partial t} &= -\lambda_j N_j + \lambda_{j-1} N_{j-1}; \end{aligned} \quad (2.2)$$

3) уравнение неразрывности фильтрационного потока

$$\operatorname{div}(\rho v) = -\frac{\partial (n\rho)}{\partial t}; \quad (2.3)$$

4) закон Дарси фильтрации жидкости

$$\bar{v} = -K \operatorname{grad} H; \quad (2.4)$$

5) уравнения кинетики массообмена и изотерм сорбции

$$\frac{\partial N_j}{\partial t} = f(C_j, N_j, C_j^*, N_j^*, \gamma_{j1}, \dots, \gamma_{jk}), \quad F(C_j^*, N_j^*, \gamma_{j1}^*, \dots, \gamma_{jk}^*) = 0. \quad (2.5)$$

Здесь приняты следующие обозначения: C_j, N_j – концентрация или объемная активность j -й компоненты цепочки радиоактивного распада, находящейся в растворенном и сорбированном состояниях соответственно, Бк/м³; C_j^*, N_j^* – то же в условиях равновесия; ψ_{ij} – составля-

ющие скорости переноса (массопотока) растворенной j -й компоненты цепочки вдоль осей декартовых координат x_i , Бк/(м²·сут). Число компонент цепочки распада, заканчивающейся стабильным изотопом, равно s ; λ_j – постоянная распада j -й компоненты, сут⁻¹; $T_{1/2,j}$ – период ее полураспада, сут. Для параметров гидрогеохимических процессов приняты следующие обозначения: D_i – компоненты тензора гидродинамической дисперсии, м²/сут; \bar{v} – скорость фильтрации подземных вод, v_i – ее компоненты, м/сут; ρ – плотность жидкости, кг/м³; K – коэффициент фильтрации, м/сут; n – активная пористость; H – пьезометрический потенциал или напор подземных вод, м; $\gamma_{j1,\dots,\gamma_{jk}}$ и $\gamma_{j1,\dots,\gamma_{jk}}^*$ – параметры кинетики массообмена и изотерм сорбции. В системе уравнений (2.1) – (2.5) неизвестными величинами являются C_j , N_j , v_i , H .

Массовые концентрации радионуклидов в подземных водах незначительны и практически не изменяют кинематику фильтрационного потока. Поэтому определение компонент скорости v_i и коэффициентов гидродисперсии D_i может быть проведено независимо от решения уравнений (2.1). В дальнейшем принимается, что фильтрационная задача, определяемая уравнениями (2.3) и (2.4), решена, а параметры v_i и D_i как известные величины, не зависящие от C_j и N_j , входят в (2.1).

Нелинейность в данной математической модели может возникнуть за счет сложных процессов массообмена. В условиях длительной миграции она может проявиться главным образом из-за нарушения линейного характера равновесной сорбции. Однако количественный анализ показывает, что даже при высокой степени радиоактивного загрязнения подземных вод можно пренебречь ограниченностью сорбционной емкости пород N_0 и аппроксимировать нелинейную изотерму Ленгмюра линейной изотермой Генри.

В самом деле, изотерму Ленгмюра можно записать в виде:

$$N = \frac{\bar{K}_d C}{1 + \bar{K}_d C / N_0} = \bar{K}_d C (1 - \alpha C + \alpha^2 C^2 - \dots), \quad (2.6)$$

где $\alpha = \bar{K}_d / N_0$, $\bar{K}_d = n \rho_p K_d / n_p$ [6], K_d – коэффициент распределения, см³/г; ρ_p – объемный вес породы, г/см³; n_p – общая пористость.

Влияние нелинейности могло бы проявиться в наибольшей степени при максимальных значениях \bar{K}_d и C и минимальном значении N_0 . Концентрация радионуклидов в подземных водах заведомо не превышает их содержание в высокоактивных отходах $C_{max} = 1$ Ки/л

(10^3 Ки/м³). С учетом минимально возможных значений N_0 и соответствующих им наибольших \bar{K}_d [6], взятых для тех же горных пород, максимум α составит $0.07 \cdot 10^{-3}$ м³/Бк, а произведения $\alpha C - 0.07$.

Максимальная ошибка при замене изотермы (2.6) линейной изотермой Генри

$$N = \bar{K}_d C \quad (2.7)$$

может рассматриваться как погрешность определения \bar{K}_d не более 7% для диапазона изменений удельной активности подземных вод от 0 до 1 Ки/л. Такая погрешность соизмерима с точностью определения миграционных параметров при весьма высоком методическом и инструментальном уровне экспериментальных работ, возможном в мировой практике [6, 10, 14, 35, 71]. В существующих зонах радиоактивного загрязнения подземных вод концентрация РВ намного ниже C_{max} , поэтому влияние нелинейности массообмена радионуклидов при решении большинства практических задач может не приниматься во внимание. Это дает возможность, используя линейную изотерму (2.7), широко применять при моделировании массопереноса РВ методы решения линейных краевых задач массопереноса [13, 25, 33, 43, 70].

Уравнения массопереноса материнского и дочерних радионуклидов могут быть получены из соотношений (2.1) и (2.2). Для материнского радионуклида ($j=1$) уравнение переноса записывается в виде

$$\operatorname{div}(D \operatorname{grad} C_1 - v C_1) + Q_1 - \frac{\partial N_1}{\partial t} - \lambda_1(n C_1 + N_1) = \frac{\partial(n C_1)}{\partial t}, \quad (2.8)$$

где D – тензор гидродисперсии.

В случае, если распад ($j-1$)-й компоненты цепочки сопровождается образованием r дочерних изотопов, то процесс переноса каждого из них, например, l -го вещества ($l=1, \dots, r$) описывается уравнением

$$\operatorname{div}(D \operatorname{grad} C_{jl} - v C_{jl}) + Q_{jl} - \frac{\partial N_{jl}}{\partial t} + p_{jl} \lambda_{j-1}(n C_{j-1} + N_{j-1}) - \lambda_{jl}(n C_{jl} + N_{jl}) = \frac{\partial(n C_{jl})}{\partial t}. \quad (2.9)$$

Здесь Q_1 и Q_{jl} – функции, задающие распределение внутренних источников поступления материнского и дочерних веществ в водоносный горизонт; C_{jl} и N_{jl} – концентрации l -го продукта распада ($j-1$)-й

компоненты в жидкой и твердой фазах, p_{jl} – его доля в общей массе продуктов распада, причем

$$\sum_{l=1}^r p_{jl} = 1, p_{jl} > 0;$$

остальные обозначения прежние. Миграция в подземных водах нескольких последовательно образующихся элементов цепочки распада может быть описана системой уравнений (2.8) – (2.9).

В случае линейной равновесной сорбции, описываемой изотермой Генри (2.7), и постоянной во времени пористости n уравнения (2.8) – (2.9) принимают вид:

$$\operatorname{div}(D \operatorname{grad} C_1 - v C_1) + Q_1 - \lambda_1 n_{e,1} C_1 = n_{e,1} \frac{\partial C_1}{\partial t}, \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(D \operatorname{grad} C_{jl} - v C_{jl}) + Q_{jl} + p_{jl} \lambda_{j-1} n_{e,j-1} C_{j-1} - \\ - \lambda_{jl} n_{e,jl} C_{jl} = n_{e,jl} \frac{\partial C_{jl}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (2.11)$$

где $n_{e,j}$ – эффективная пористость относительно j -го радионуклида, определяемая соотношением $n_{e,j} = n + \bar{K}_{d,j}$.

При выполнении прогнозов миграции на больших по площади территориях правомерен переход к двумерным моделям горизонтального переноса. Предпосылки такого перехода могут быть сформулированы для условий применимости гидравлической теории фильтрации [10, 44]: 1) горизонтальные размеры водоносного пласта на два-три порядка выше его вертикальных размеров; 2) горизонтальные размеры источника поступления вещества в несколько раз больше вертикальных размеров пласта, либо вертикальный размер источника соразмерен с мощностью пласта; 3) поток вещества через кровлю и подошву пренебрежимо мал по сравнению с потоком в горизонтальном направлении. В этом случае уравнения (2.10) и (2.11) записываются в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(m_0 \left(D_x \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial x} - v_x \bar{C}_1 \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(m_0 \left(D_y \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial y} - v_y \bar{C}_1 \right) \right) + Q_1 - \\ - \lambda_1 m_0 n_{e,1} \bar{C}_1 = m_0 n_{e,1} \frac{\partial \bar{C}_1}{\partial t}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(m_0 \left(D_x \frac{\partial \bar{C}_{jl}}{\partial x} - v_x \bar{C}_{jl} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(m_0 \left(D_y \frac{\partial \bar{C}_{jl}}{\partial y} - v_y \bar{C}_{jl} \right) \right) +$$

$$+ Q_{jl} + p_{j-1} \lambda_{j-1} n_{e,j-1} m_0 \bar{C}_{j-1} - \lambda_{jl} n_{e,jl} m_0 \bar{C}_{jl} = n_{e,jl} m_0 \frac{\partial \bar{C}_{jl}}{\partial t}, \quad (2.13)$$

где $\bar{C}_j(x, y, t) = \frac{1}{m_0} \int_{z_{\min}}^{z_{\max}} C_j(x, y, z, t) dz$ – осредненная по мощности пласта

концентрация j -й компоненты в точке (x, y) , $m_0(x, y) = z_{\max}(x, y) - z_{\min}(x, y)$ – вертикальный размер области массопереноса, остальные обозначения прежние. В дальнейшем изложении черта над $C_j(x, y, t)$ как знак осреднения не указывается для упрощения.

Условия

$$C_j(x, y, z, 0) = C_{j,0}(x, y, z), \quad (2.14)$$

$$C_j(x, y, 0) = C_{j,0}(x, y), \quad (2.15)$$

задают распределение компонент цепочки соответственно в трехмерных и двумерных областях фильтрации в момент времени, принимаемый за начальный. С их помощью можно моделировать «мгновенные» источники, продолжительность действия которых незначительна по сравнению с периодом полураспада и рассматриваемым отрезком времени.

При решении практических задач наиболее часто встречаются следующие типы границ области массопереноса [8, 10, 13, 30, 85]:

1) граничное сечение фильтрационного потока полностью контактирует с поверхностными водами, отвод вещества за пределы области возможен диффузионным и конвективным путем;

2) граничное сечение фильтрационного потока расположено выше уровня поверхностных вод и не контактирует с ними, отвод вещества за пределы области возможен только конвективным путем (т. н. «высачивание» или родниковый сток);

3) как и в случае «2», граничное сечение фильтрационного потока расположено выше уровня поверхностных вод и не контактирует с ними, но отвод вещества конвекцией за пределы области снижен за счет частичного испарения вытекающей воды. Такой тип границы характерен для территорий с большой испаряемостью.

На границе «1» формулируется условие Данквертса-Бреннера

$$D \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = v_n (C - C_s), \quad (2.16)$$

где n – нормаль к границе Γ , C_s – концентрация вещества в поверхностных водах. При высоких значениях скорости фильтрации в граничном сечении v_n ему приближенно соответствует условие первого рода:

$$C \Big|_{\Gamma} = C_s. \quad (2.17)$$

На границе «2» ставится условие равенства нулю диффузионного потока

$$\frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = 0. \quad (2.18)$$

На границе «3» может быть задано условие

$$D \frac{\partial C}{\partial n} \Big|_{\Gamma} + \alpha v_n C = 0, \quad (2.19)$$

где $\alpha = \varepsilon / |v_n|$, ε – испаряемость, м/сут. При $\alpha=0$ условие (2.19) переходит в (2.18), а соотношение $\alpha=1$ означает полное испарение, прекращение выноса вещества и его накопление вблизи границы.

На значительно удаленных границах принимается условие равенства нулю градиента концентрации, записываемое покомпонентно в виде

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad x \rightarrow \infty, \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad y \rightarrow \infty, \quad \frac{\partial C}{\partial z} = 0, \quad z \rightarrow \infty. \quad (2.20)$$

Возможность перехода к двумерным в плане моделям массопереноса следует обосновывать анализом массообмена через кровлю и подошву водоносного горизонта. Практически важным является определение концентрации только в хорошо проницаемом слое. Предлагаемое граничное условие третьего рода на подошве водоносного горизонта (контакте со слабопроницаемым слоем) основывается на следующих предположениях: 1) применима гидравлическая теория фильтрации, вертикальная составляющая скорости фильтрации равна нулю [10, 44]; 2) скорость сорбции радионуклидов в глинистых породах водоупора на два-три порядка ниже, чем в песчаных породах водоносного пласта [6];

3) сорбционная емкость пород, слагающих водоупорное основание, более чем на порядок выше, чем у пород хорошо проницаемого слоя;
 4) сорбция радионуклидов в водоупоре происходит в его небольшом верхнем слое толщиной l (по данным [6] продвижение ^{90}Sr в моренном суглинке при скорости фильтрации 10^{-3} м/сут за 1.5–3 года составило несколько сантиметров).

Граничное условие на подошве водоносного пласта имеет вид

$$-D_z \frac{\partial C}{\partial z} = \beta l(C - C_e), \quad (2.21)$$

где D_z – коэффициент конвективной диффузии в вертикальном направлении; β – скорость сорбции радионуклида в породах водоупора, сут $^{-1}$; C_e – фоновая концентрация вещества в поровом растворе в породах кровли водоупора.

Распределение источников поступления радионуклидов в пределах области фильтрации Q_j с учетом путей их поступления в подземные воды целесообразно представить в виде

$$Q_j^{(3D)} = q_{0,j} \bar{q}_j(t) A_j^{(3D)}(x, y, z), \quad Q_j^{(2D)} = q_{0,j} \bar{q}_j(t) A_j^{(2D)}(x, y),$$

для пространственных и плановых задач соответственно. Величина $q_{0,j}$ соответствует максимальной интенсивности поступления j -й компоненты цепочки в область миграции в зависимости от размерности задачи; $A_j^{(3D)}$ и $A_j^{(2D)}$ – безразмерные функции, характеризующие распределение источников выделения вещества в пространстве или на плоскости; $\bar{q}_j(t)$ – безразмерная функция, отражающая интенсивность этих источников во времени.

Важным частным случаем $\bar{q}_j(t)$ является зависимость вида

$$\bar{q}_j(t) = \exp(-\lambda_j t), \quad (2.22)$$

отражающая убывание активности вследствие распада. Для приповерхностных могильников, содержащих твердые отходы, интенсивность поступления радионуклидов в подземные воды при непосредственном контакте с ними может быть принята равной аналогично [20]:

$$Q_j(x, t) = A_{0,j} K_{v,j} \exp(-(K_{v,j} + \lambda_j) t), \quad (2.23)$$

$$A_{0j}(x) = \begin{cases} A_{sum,j}/(S \cdot L_p), & 0 \leq x \leq L_p, \\ 0, & L_p < x < L; \end{cases}$$

где $A_{sum,j}$ – исходные запасы радионуклида в источнике; L_p – длина участка ленты тока фильтрационного потока, на котором находится источник; L – ее общая длина; S – ширина ленты тока; $K_{v,j} = \ln 2/T_{pv,j}$ – константа скорости выведения или перехода радионуклидов из твердой в жидкую фазу, сут⁻¹; $T_{pv,j}$ – период полувыведения радионуклида из твердой фазы, например, топливных частиц, сут.

Выражения для $C_{j,0}$ и Q_j предлагается задавать с помощью финитных, в том числе ступенчатых функций, что дает возможность адекватно отобразить форму и характер действия реально существующих источников поступления РВ, а также избежать не соответствующих физике процесса чисто математических особенностей, неизбежно возникающих в схемах точечного источника [35].

Геометрическая форма источников поступления РВ в подземные воды на реальных объектах имеет самый разнообразный вид, и в общем случае для двумерной области представляет собой фигуру, ограниченную произвольным замкнутым криволинейным контуром. Форму источника предлагается аппроксимировать с помощью двух геометрических фигур – прямоугольника или многоугольника, произвольно ориентированных относительно скорости фильтрации. Тогда функции $C_{j,0}$ и Q_j могут быть записаны в виде

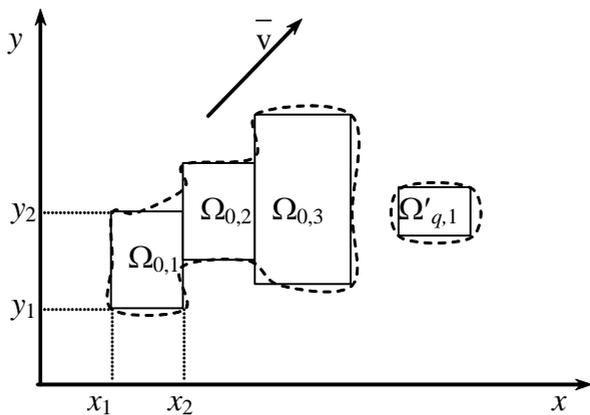
$$C_{j,0}(x, y) = \sum_{k=1}^M C_{0,jk} \zeta_{jk}(x, y) + C_{e,j}, \quad (2.24)$$

$$Q_j(x, y, t) = \sum_{k=1}^M q_{jk} \bar{q}_{jk}(t) \zeta'_{jk}(x, y); \quad (2.25)$$

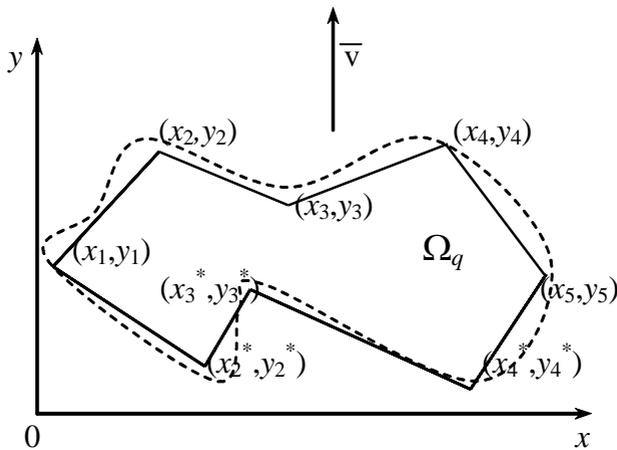
$$\zeta_{jk} = \begin{cases} 1, & (x, y) \in \Omega_{jk}, \\ 0, & (x, y) \notin \Omega_{jk}; \end{cases}$$

функции ζ'_{jk} определяется аналогично ζ_{jk} . Здесь $C_{e,j}$ – естественная (фоновая) концентрация j -й компоненты при $t=0$. Совокупность областей Ω_{jk} и Ω'_{jk} позволяет отобразить с необходимой точностью на

плоскости расположение источников поступления РВ в водоносный горизонт (рис. 2.1).



а)



б)

Рис. 2.1. Геометрическая аппроксимация источников поступления РВ в подземные воды на плоскости: а) совокупностью прямоугольников, б) в виде многоугольника. Штриховыми кривыми показано положение источников, сплошными линиями – их аппроксимацию.

Предложенный способ аппроксимации определяется следующими факторами [20, 29, 38, 67]: формой объектов, на которых локализуются или перерабатываются РАО; характером рельефа местности, на которой могут храниться и накапливаться РВ и т.д. В принципе любая форма на плоскости может быть с необходимой точностью аппроксимирована многоугольником. Однако во многих случаях оказывается достаточным и более удобным использование одного или нескольких прямоугольников.

В силу принципа суперпозиции [43, 70] решение краевых задач для начальных условий вида (2.24), (2.25) может быть сведено к решению задач с функциями $C_{j,0}$ и Q_j более простого вида:

$$C_{j,0}(x, y) = \begin{cases} C'_{j,0} + C_{e,j}, & (x, y) \in \Omega_{0,j}, \\ C_{e,j}, & (x, y) \notin \Omega_{0,j}; \end{cases} \quad (2.26)$$

$$Q_{j,0}(x, y, t) = \begin{cases} q_j \bar{q}_j(t), & (x, y) \in \Omega_{q,j}, \\ 0, & (x, y) \notin \Omega_{q,j}; \end{cases} \quad (2.27)$$

где $C_{j,0}(x, y) > 0$, области $\Omega_{0,j}$ и $\Omega_{q,j}$ представляют собой прямоугольники или многоугольники.

В схеме прямоугольного источника области Ω_0 и Ω_q определяются следующим образом:

$$\Omega_0 = \{(x, y): x_1 \leq x \leq x_2, y_1 \leq y \leq y_2\}, \quad (2.28)$$

$$\Omega_q = \{(x, y): \bar{x}_1 \leq x \leq \bar{x}_2, \bar{y}_1 \leq y \leq \bar{y}_2\}. \quad (2.29)$$

В схеме многоугольного источника выделяются верхний и нижний контуры, которые соединяются в точках с минимальной и максимальной абсциссой. Координаты угловых точек верхнего контура области Ω_0 обозначены через $(x_1, y_1), \dots, (x_{p+1}, y_{p+1})$, нижнего контура – $(x_1^*, y_1^*), \dots, (x_{r+1}, y_{r+1}^*)$; в области Ω_q соответственно для верхнего контура $(\bar{x}_1, \bar{y}_1), \dots, (\bar{x}_{p+1}, \bar{y}_{p+1})$, нижнего контура – $(\bar{x}_1^*, \bar{y}_1^*), \dots, (\bar{x}_{r+1}, \bar{y}_{r+1}^*)$. Очевидно, что

$$x_1 = x_1^*, y_1 = y_1^*, x_{p+1} = x_{r+1}^*, y_{p+1} = y_{r+1}^*;$$

$$\bar{x}_1 = \bar{x}_1^*, \bar{y}_1 = \bar{y}_1^*, \bar{x}_{p+1} = \bar{x}_{r+1}^*, \bar{y}_{p+1} = \bar{y}_{r+1}^*$$

Угловые коэффициенты отрезков, соединяющих точки верхнего и нижнего контуров, обозначены через k_1, \dots, k_p и k_1^*, \dots, k_r^* для области Ω_0 и $\bar{k}_1, \dots, \bar{k}_p$ и $\bar{k}_1^*, \dots, \bar{k}_r^*$ для области Ω_q . Ось Oy совмещена с направлением скорости фильтрации ($v_x=0, v_y=v$).

Область Ω_0 можно представить в виде $\Omega_0 = \Omega_{0,1} \cap \Omega_{0,2}$, где

$$\Omega_{0,1} = \{(x, y): x_i \leq x \leq x_{i+1}, (y - y_i) \leq k_i(x - x_i), i=1, \dots, p\}, \quad (2.30)$$

$$\Omega_{0,2} = \{(x, y): x_i^* \leq x \leq x_{i+1}^*, (y - y_{i+1}^*) \leq k_i^*(x - x_i^*), i=1, \dots, r\}. \quad (2.31)$$

Аналогичное представление имеет и область Ω_q . Описанный способ аппроксимации источников поступления веществ в подземные воды с соответствующими изменениями переносится на пространственный случай.

Во многих случаях исходные данные не могут удовлетворить условиям корректной разрешимости краевой задачи в классическом смысле. Тогда рассматривают более широкие классы функций и вводят понятия обобщенных решений. Условия разрешимости сформулированных в данном разделе краевых задач для уравнений параболического типа могут быть сформулированы на основании результатов, изложенных в [1, 31].

2.2. Моделирование переноса компонент цепочки распада

Разработанная модель горизонтального переноса [53, 56, 58], наряду с факторами конвекции, дисперсии и распада, учитывает отличие сорбционных свойств горных пород относительно различных компонент цепочки.

Массоперенос материнского и $(s-1)$ образующихся по цепочке дочерних веществ в водоносном горизонте средней мощности m_0 может быть описан последовательностью дифференциальных уравнений

$$D_{x,1} \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} + D_{y,1} \frac{\partial^2 C_1}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C_1}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_1}{\partial y} - \lambda_1 n_{e,1} C_1 + \frac{Q_1}{m_0} = n_{e,1} \frac{\partial C_1}{\partial t}, \quad (2.32)$$

$$\dots\dots\dots$$

$$D_{x,j} \frac{\partial^2 C_j}{\partial x^2} + D_{y,j} \frac{\partial^2 C_j}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C_j}{\partial x} - v_y \frac{\partial C_j}{\partial y} -$$

$$- \lambda_j n_{e,j} C_j + \lambda_{j-1} n_{e,j-1} C_{j-1} = n_{e,j} \frac{\partial C_j}{\partial t}, \quad (2.33)$$

где C_j – концентрации материнского ($j=1$) и дочерних ($j=2, \dots, s$) веществ в подземных водах; $D_{x,j}$, $D_{y,j}$ – коэффициенты гидродисперсии, v_x , v_y – компоненты скорости фильтрации; $n_{e,j}$ – коэффициенты эффективной пористости; λ_j – постоянные распада. Источниковый член Q_j рассматривается только в первом уравнении (2.32), поскольку непосредственное поступление дочерних веществ в водоносный горизонт ($Q_j > 0$, $j=2, \dots, s$) моделируется аналогично материнскому веществу.

Система уравнений (2.32) – (2.33) соответствует случаю, когда при распаде каждого вещества образуется только одно дочернее вещество. Другая ситуация, когда одно материнское вещество порождает несколько дочерних, может быть описана введением соответствующих коэффициентов перед слагаемыми $\lambda_{j-1} n_{e,j-1} C_{j-1}$, как в уравнениях (2.9), (2.11), (2.13).

На удаленных границах задаются условия

$$\frac{\partial C_j}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial C_j}{\partial y} = 0. \quad (2.34)$$

Начальное распределение материнского вещества и источник его поступления в водоносный горизонт задаются согласно схемам прямоугольника и многоугольника.

Метод решения системы (2.32) – (2.33) основан на последовательном определении концентраций C_j , причем слагаемые $\lambda_{j-1} n_{e,j-1} C_{j-1}$ рассматриваются как источниковый член в уравнении массопереноса. Аналитическое решение системы для условий (2.32) получено методом источников по формулам

$$C_j(x, y, t) = R_j(x, y, t) + C_{e,j}, \quad (2.35)$$

$$R_1(x, y, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G_1(x, y, \xi, \eta, t) C_{1,0}(\xi, \eta) d\xi d\eta + \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G_1(x, y, \xi, \eta, t - \tau) Q'_1(\xi, \eta, \tau) d\xi d\eta d\tau, \quad (2.36)$$

$$R_1(x, y, t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G_j(x, y, \xi, \eta, t - \tau) Q'_j(\xi, \eta, \tau) d\xi d\eta d\tau, \quad (2.37)$$

где $G_j(x, y, \xi, \eta, t)$ – функция мгновенного точечного источника,

$$G_j(x, y, \xi, \eta, t) = \frac{e^{-\lambda_j t}}{4\pi t \sqrt{D_{x,j}^* D_{y,j}^*}} \exp \left\{ -\frac{(x - \xi - v_{x,j}^* t)^2}{4D_{x,j}^*} - \frac{(y - \eta - v_{y,j}^* t)^2}{4D_{y,j}^*} \right\}, \quad (2.38)$$

$$Q'_1 = \frac{Q_1}{m_0 n_{e,1}} - \lambda_1 C_{e,1}, \quad Q'_j = \frac{n_{e,j-1}}{n_{e,1}} \lambda_{j-1} (R_{j-1} - C_{e,j-1}) - \lambda_j C_{e,j},$$

$$D_{x,j}^* = \frac{D_{x,j}}{n_{e,j}}, \quad D_{y,j}^* = \frac{D_{y,j}}{n_{e,j}}, \quad v_{x,j}^* = \frac{v_x}{n_{e,j}}, \quad v_{y,j}^* = \frac{v_y}{n_{e,j}}.$$

Опуская промежуточные выкладки, можно записать формулы для расчета концентрации материнского и первого дочернего вещества в виде

$$C_1(x, y, t) = C_{e,1} e^{-\bar{\lambda}_1 t} + C_{0,1} \Phi(\mu_{1,x}, \mu_{2,x}, w_{x,1}) \Phi(\mu_{1,y}, \mu_{2,y}, w_{y,1}) + \frac{q_0 t}{m_0 n_{e,1}} \int_0^1 \bar{q}(t(1-\theta)) e^{-\bar{\lambda}_1 \theta} \Phi\left(\frac{\bar{\mu}_{1,x}}{\sqrt{\theta}}, \frac{\bar{\mu}_{2,x}}{\sqrt{\theta}}, w_{x,1} \sqrt{\theta}\right) \Phi\left(\frac{\bar{\mu}_{1,y}}{\sqrt{\theta}}, \frac{\bar{\mu}_{2,y}}{\sqrt{\theta}}, w_{y,1} \sqrt{\theta}\right) d\theta, \quad (2.39)$$

$$\Phi(z_1, z_2, z_3) = 0.5 \{ \operatorname{erfc}(z_1 - z_3) - \operatorname{erfc}(z_2 - z_3) \}, \quad (2.40)$$

$$\mu_{1,x} = g_x(x_1 - x), \quad \mu_{2,x} = g_x(x_2 - x), \\ g_x = \frac{1}{2\sqrt{D_{x,1}^* t}}, \quad g_y = \frac{1}{2\sqrt{D_{y,1}^* t}}, \quad \bar{\lambda}_1 = \lambda_1;$$

$\bar{\mu}_{1,y}, \bar{\mu}_{2,y}$ определяются аналогично $\bar{\mu}_{1,x}, \bar{\mu}_{2,x}$;

$$C_2(x, y, t) = C_{1,0} \frac{n_{e,1} e^{-\bar{\lambda}_1}}{n_{e,2}} \times \int_0^1 e^{(\bar{\lambda}_1 - \bar{\lambda}_2)\omega} S(a_{1,x}, a_{2,x}, a_{3,x}) S(a_{1,y}, a_{2,y}, a_{3,y}) d\omega + \quad (2.41)$$

$$+ \bar{\lambda}_1 \frac{t n_{e,1}}{m_0 n_{e,2}} e^{-\bar{\lambda}_1} \int_0^1 (1-\omega) \int_0^1 q(t(1-\omega)(1-\theta)) e^{-\bar{\lambda}_1 \theta(1-\omega) - \bar{\lambda}_2 \omega} \times \\ \times S(r_{1,x}, r_{2,x}, r_{3,x}) S(r_{1,y}, r_{2,y}, r_{3,y}) d\omega d\theta,$$

$$S(z_1, z_2, z_3) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\psi^2} [\operatorname{erf}(z_1 - \psi z_3) - \operatorname{erf}(z_2 - \psi z_3)] d\psi, \quad (2.42)$$

$$a_{i,x} = \frac{\mu_{i,x} - w_{x,2} \sigma_x \omega}{\sqrt{1-\omega}} - w_{x,1} \sqrt{1-\omega}, \quad a_{i,y} = \frac{\mu_{i,y} - w_{y,2} \sigma_y \omega}{\sqrt{1-\omega}} - w_{y,1} \sqrt{1-\omega};$$

$$r_{i,x} = \frac{\bar{\mu}_{i,x} - w_{x,2} \sigma_x \omega}{\sqrt{(1-\omega)\theta}} - w_{x,1} \sqrt{(1-\omega)\theta}, \quad r_{i,y} = \frac{\bar{\mu}_{i,y} - w_{y,2} \sigma_y \omega}{\sqrt{(1-\omega)\theta}} - w_{y,1} \sqrt{(1-\omega)\theta};$$

$$a_{3,x} = \frac{\sigma_x \sqrt{\omega}}{\sqrt{1-\omega}}, \quad a_{3,y} = \frac{\sigma_y \sqrt{\omega}}{\sqrt{1-\omega}}, \quad r_{3,x} = \frac{a_{3,x}}{\sqrt{\theta}}, \quad r_{3,y} = \frac{a_{3,y}}{\sqrt{\theta}}, \quad i=1,2;$$

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{D_{x,2}}{D_{x,1}}}, \quad \sigma_y = \sqrt{\frac{D_{y,2}}{D_{y,1}}}, \quad w_{x,2} = \frac{v_{x,2}^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_{x,2}^*}}, \quad w_{y,2} = \frac{v_{y,2}^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_{y,2}^*}}, \quad \bar{\lambda}_2 = \lambda_2 t.$$

Интегралы, входящие в выражения (2.39) – (2.42), целесообразно вычислять с использованием квадратур Гаусса и Эрмита, что позволяет достичь высокой точности численного интегрирования.

Для проведения вычислений оказываются важными следующие свойства функций Φ и S , определяющие характер полученных решений. Во-первых, $z_1 > z_2$ в (2.42) при любых значениях исходных параметров, поэтому эти функции неотрицательны. Во-вторых, максимум, который достигают Φ и S при $z_1 \rightarrow \infty$, $z_2 \rightarrow -\infty$ и конечном z_3 , равен 1.

Минимальное значение Φ , равное 0, достигается при $z_1 \rightarrow z_2$, а S – при $z_1 \rightarrow z_2$, или $z_1 \rightarrow -\infty$, или $z_2 \rightarrow +\infty$. Хотя значения этих функций больше нуля, однако для любого достаточно малого $\varepsilon > 0$ всегда можно определить такую область изменения параметров, вне которой для любых (x, y, t) имеет место: $\Phi(x, y, t) < \varepsilon$ или $S(x, y, t) < \varepsilon$. Это свойство позволяет оптимизировать вычислительную реализацию формул (2.39) – (2.42), что показано в разделе 3.1.

В [53] представлены аналитические решения уравнений (2.32) – (2.33) для случая многоугольного источника, которые позволяют с большей точностью отразить форму источника поступления веществ в водоносный горизонт. В [58] с помощью аналитического решения для материнского вещества выполнен анализ точности конечно-разностного алгоритма путем сравнения вычислений, проведенных при различных значениях параметров переноса и шагах сетки.

Интегрирование для схемы многоугольного источника проводится аналогично формулам (2.35) – (2.37), при этом вместо функции мгновенного точечного источника (2.38) используется выражение

$$G_j(x, y, \xi, \eta, t) = \frac{e^{-\lambda_j t}}{4\pi t \sqrt{D_{T,j}^* D_{L,j}^*}} \exp \left\{ -\frac{(x - \xi)^2}{4D_{T,j}^*} - \frac{(y - \eta - v_j^* t)^2}{4D_{L,j}^*} \right\}, \quad (2.43)$$

$$D_{T,j}^* = \frac{D_{T,j}}{n_{e,j}}, \quad D_{L,j}^* = \frac{D_{L,j}}{n_{e,j}}, \quad v_j^* = \frac{v}{n_{e,j}}.$$

где D_T, D_L – коэффициенты поперечной и продольной гидродисперсии.

Окончательные выражения для материнского радионуклида записываются в следующем виде:

а) для мгновенного источника

$$C_1(x, y, t) = \frac{C_{0,1}}{4} e^{-\bar{\lambda}} \times \left\{ \sum_{i=1}^p U_1(\gamma_i, \gamma_{i+1}, \rho_i, k_i, \chi, w) - \sum_{i=1}^r U_1(\gamma_i^*, \gamma_{i+1}^*, \rho_i^*, k_i^*, \chi, w) \right\}, \quad (2.44)$$

б) для непрерывно действующего источника

$$C_1(x, y, t) = \frac{t}{4m_0 n_{e,1}} \times \left\{ \sum_{i=1}^p V_1(\gamma_i, \gamma_{i+1}, \rho_i, k_i, \chi, w, \bar{\lambda}) - \sum_{i=1}^r V_1(\gamma_i^*, \gamma_{i+1}^*, \rho_i^*, k_i^*, \chi, w, \bar{\lambda}) \right\}, \quad (2.45)$$

где

$$U_1(\gamma_i, \gamma_{i+1}, \rho_i, k_i, \chi, w) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\gamma_{i+1}}^{\gamma_i} e^{-\xi^2} \operatorname{erf}(k_i \chi \xi + \rho_i - w) d\xi, \quad (2.46)$$

$$V_1(\gamma_i, \gamma_{i+1}, \rho_i, k_i, \chi, w, \bar{\lambda}) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^1 e^{-\bar{\lambda}_1 \theta} q(t(1-\theta)) \int_{\gamma_{i+1}/\sqrt{\theta}}^{\gamma_i/\sqrt{\theta}} e^{-\xi^2} \operatorname{erf}\left(k_i \chi \xi + \frac{\rho_i - w\theta}{\sqrt{\theta}}\right) d\xi d\theta, \quad (2.47)$$

$$\rho_i = g_y((y - y_i) - k_i(x - x_i)), \quad \gamma_i = g_x(x - x_i),$$

$$\rho_i^* = g_y((y - y_i^*) - k_i^*(x - x_i^*)), \quad \gamma_i^* = g_x(x - x_i^*),$$

$$g_x = \frac{1}{2\sqrt{D_T^*}}, \quad g_y = \frac{1}{2\sqrt{D_L^*}}, \quad w_1 = \frac{v_1^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_L^*}}, \quad \chi = \sqrt{\frac{D_T^*}{D_L^*}}.$$

Окончательные выражения для первого дочернего радионуклида записываются в следующем виде:

а) для мгновенного источника

$$C_2(x, y, t) = \frac{C_0 \bar{\lambda}_1 e^{-\bar{\lambda}_1} \sigma_n}{4} \times \left\{ \sum_{i=1}^p U_2(\gamma_i, \gamma_{i+1}, \rho_i, k_i, \bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \chi, \sigma_L, \sigma_T, w_1, w_2) - \sum_{i=1}^r U_2(\gamma_i^*, \gamma_{i+1}^*, \rho_i^*, k_i^*, \bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \chi, \sigma_L, \sigma_T, w_1, w_2) \right\}, \quad (2.48)$$

б) для непрерывно действующего источника

$$C_2(x, y, t) = \frac{q_0 t \bar{\lambda}_1 e^{-\bar{\lambda}_1} \sigma_n}{4m_0} \times \left\{ \sum_{i=1}^p V_2(\gamma_i, \gamma_{i+1}, \rho_i, \bar{k}_i, \bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \chi, \sigma_L, \sigma_T, w_1, w_2) - \sum_{i=1}^r V_2(\gamma_i^*, \gamma_{i+1}^*, \rho_i^*, \bar{k}_i^*, \bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \chi, \sigma_L, \sigma_T, w_1, w_2) \right\}, \quad (2.49)$$

где

$$U_2(\gamma_i, \gamma_{i+1}, \rho_i, k_i, \bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \chi, \sigma_L, \sigma_T, w_1, w_2) = \frac{2}{(\sqrt{\pi})^3} \int_0^1 e^{(\bar{\lambda}_1 - \bar{\lambda}_2)\theta} \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta^2} \int_{\gamma_{i+1}}^{\gamma_i} e^{-\zeta^2} \operatorname{erf}(a'\alpha + b_i'\beta + h_i'\zeta + s_i') d\zeta d\beta d\alpha d\theta, \quad (2.50)$$

$$V_2(\gamma_i, \gamma_{i+1}, \rho_i, k_i, \bar{\lambda}_1, \bar{\lambda}_2, \chi, \sigma_L, \sigma_T, w_1, w_2) = \frac{2}{(\sqrt{\pi})^3} \int_0^1 \int_0^1 \bar{q}((1-\omega)(1-\theta)\iota)(1-\omega) \exp\{-\bar{\lambda}_2\omega - \bar{\lambda}_1\theta(1-\omega)\} \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta^2} \int_{\gamma_{i+1}}^{\gamma_i} e^{-\zeta^2} \operatorname{erf}(a''\alpha + b_i''\beta + h_i''\zeta + s_i'') d\zeta d\beta d\alpha d\omega d\theta; \quad (2.51)$$

$$a' = -\frac{\sigma_L \sqrt{\omega}}{\sqrt{1-\omega}}, \quad b' = \frac{k_i \sigma_T \chi \sqrt{\omega}}{\sqrt{1-\omega}}, \quad h_i' = k_i \chi, \quad s_i' = \frac{\rho_i - w_2 \sigma_L \omega}{\sqrt{1-\omega}} - w_1 \sqrt{1-\omega};$$

$$a'' = -\frac{\sigma_L \sqrt{\omega}}{\sqrt{(1-\omega)\theta}}, \quad b'' = \frac{\bar{k}_i \sigma_T \chi \sqrt{\omega}}{\sqrt{(1-\omega)\theta}}, \quad h_i'' = \bar{k}_i \chi, \quad s_i'' = \frac{\bar{\rho}_i - w_2 \sigma_L \omega}{\sqrt{(1-\omega)\theta}} - w_1 \sqrt{(1-\omega)\theta};$$

$$\gamma_i' = \frac{\gamma_i - \sigma_T \sqrt{\omega} \beta}{\sqrt{1-\omega}}, \quad \gamma_i'' = \frac{\bar{\gamma}_i - \sigma_T \sqrt{\omega} \beta}{\sqrt{(1-\omega)\theta}}, \quad \sigma_T = \sqrt{\frac{D_{T,2}}{D_{T,1}}}, \quad \sigma_L = \sqrt{\frac{D_{L,2}}{D_{L,1}}}, \quad \sigma_n = \frac{n_{e,2}}{n_{e,1}},$$

$$w_2 = \frac{v_2^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_{L,2}^*}}, \quad v_2^* = \frac{v}{n_{e,2}}.$$

Выражения (2.44), (2.45), (2.49), (2.50) приведены без слагаемых, отражающих изменение фоновой концентрации радионуклидов.

Формулы (2.44) – (2.51) справедливы для любого многоугольника, в том числе и для прямоугольника. Таким образом, выражения (2.39) и (2.41) могут быть получены из формул (2.44), (2.45), (2.49), (2.50) как частный случай при соответствующем расположении источника. Следует отметить наиболее важные свойства полученных в ходе интегрирования функций U_1 , V_1 , U_2 , V_2 . При различных значениях параметров, а для V_1 и V_2 при $|\bar{q}(t)| \leq 1$, они принимают значения из диапазона $[-2, 2]$. При $\gamma_i \rightarrow -\infty$ или $\gamma_{i+1} \rightarrow +\infty$ (всегда $\gamma_i > \gamma_{i+1}$) значения этих функций стремятся к нулю. Эти свойства позволяют оптимизировать вычислительную реализацию полученных решений, что показано в разделе 3.1.

Полученные соотношения дают возможность прогнозировать перенос дочерних веществ независимо от переноса материнского вещества; кроме того, они могут использоваться для проверки точности численных моделей многокомпонентного массопереноса. Вместе с тем, формулы для расчета концентрации дочернего радионуклида по схеме многоугольника получены в виде четырех- и пятикратных квадратур, что затрудняет проведение вычислений. Поэтому особенности совместной миграции компонент цепочки распада целесообразно исследовать с помощью соотношений (2.39) – (2.42).

2.3. Учет размеров источника и типов границ в моделях миграции

2.3.1 Расщепление уравнения массопереноса

Полученные в предыдущем разделе формулы применимы тогда, когда влияние внутренних источников поступления веществ не достигает границ области. Ниже рассматривается двух- и трехмерный массоперенос в случаях, когда вещество распространяется за пределы области фильтрации.

Применение аналитических методов (источников, интегральных преобразований и т.д.) в общепринятой формулировке для решения таких задач в областях с границами различных типов часто сопряжено со сложными и громоздкими выкладками. Получение результатов теми же методами упрощается, если решение задачи с двумя или тремя пространственными переменными в канонических областях отыскивается в виде произведения решений задач, зависящих от одной пространственной переменной и времени.

Указанный метод практически применялся в [25, 73, 74] для решения некоторых задач теплопроводности. С приведением соответствующего доказательства ниже он распространяется на более широкий класс задач. Излагаемый метод является в некотором смысле аналитическим аналогом численных методов покомпонентного расщепления, использованных в [24] для конечно-разностного решения задач переноса и диффузии.

Уравнение параболического типа

$$LC \equiv \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_i(x_i, t) \frac{\partial C}{\partial x_i} - v_i(x_i, t) C \right) - \lambda n(t) C - n(t) \frac{\partial C}{\partial t} = -Q(x_1, x_2, x_3, t) \quad (2.52)$$

рассматривается в ортогональной системе координат (x_1, x_2, x_3) в области $\Omega_T = \Omega \times (0, T]$, $\Omega = \prod_{i=1}^3 (a_i, b_i)$, a_i, b_i принимают любые значения на вещественной прямой, в том числе $\pm\infty$. На границе Γ заданы условия

$$B_{i1}C \equiv \alpha_i(t) \frac{\partial C}{\partial x_i} - \beta_i(t) C = 0, \quad x_i = a_i, \quad t > 0, \quad (2.52)$$

$$B_{i2}C \equiv \xi_i(t) \frac{\partial C}{\partial x_i} - \eta_i(t) C = 0, \quad x_i = b_i, \quad t > 0; \quad (2.54)$$

причем $|\alpha_i| + |\beta_i| > 0$, $|\xi_i| + |\eta_i| > 0$. Начальные условия имеют вид

$$C|_{t=0} = C_0(x_1, x_2, x_3), \quad (2.55)$$

выполнены условия согласованности при $t=0$. Предположим, что коэффициенты уравнения и граничных условий, функции C_0 и Q выбраны так, что задача (2.52) – (2.55) корректно разрешима. Тогда справедлива следующая

Теорема. Пусть функции C_0 и Q допускают разделение переменных:

$$C_0(x_1, x_2, x_3) = C_{01}(x_1)C_{02}(x_2)C_{03}(x_3), \quad (2.56)$$

$$Q_0(x_1, x_2, x_3, t) = q_1(x_1)q_2(x_2)q_3(x_3)q_t(t). \quad (2.57)$$

Пусть, кроме того, $R_i(x_i, t)$ – решение уравнения

$$L_i R_i \equiv \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_i^*(x_i, t) \frac{\partial R_i}{\partial x_i} - v_i^*(x_i, t) R_i \right) - \frac{\partial R_i}{\partial t} = 0, \quad (2.58)$$

где $D_i^*(x_i, t) = D_i(x_i, t)/n(t)$, $v_i^*(x_i, t) = v_i(x_i, t)/n(t)$, при условиях

$$R_i|_{t=0} = R_{0i}(x_i), \quad (2.59)$$

$$B_{i1}R_i = 0, \quad x_i = a_i, \quad t > 0, \quad (2.60)$$

$$B_{i2}R_i = 0, \quad x_i = b_i, \quad t > 0. \quad (2.61)$$

Тогда

1) если $C_i(x_i, t) = R_i(x_i, t)$ – решение задачи (2.58) – (2.61) при $R_{0i} = C_{0i}$, то решение (2.52) – (2.55) при $Q = 0$ дается в виде:

$$C(x_1, x_2, x_3, t) = e^{-\lambda t} C_1(x_1, t) C_2(x_2, t) C_3(x_3, t); \quad (2.62)$$

2) если $C_i(x_i, t) = R_i(x_i, t)$ – решение задачи (2.58) – (2.61) при $R_{0i} = q_i$, то решение (2.52) – (2.55) при $C_0 = 0$ дается в виде

$$C(x_1, x_2, x_3, t) = \int_0^t e^{-\lambda(t-\tau)} \frac{q_t(\tau)}{n(\tau)} C_1(x_1, t-\tau) C_2(x_2, t-\tau) C_3(x_3, t-\tau) d\tau. \quad (2.63)$$

Замечание. Функции $R_i(x_i, t)$ могут быть получены независимо друг от друга любыми из известных точных методов.

Доказательство. Используя подстановку

$$C(x_1, x_2, x_3, t) = e^{-\lambda t} R(x_1, x_2, x_3, t), \quad (2.64)$$

можно перейти от (2.52) – (2.55) к эквивалентной ей задаче:

$$L^* R_i \equiv \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_i^*(x_i, t) \frac{\partial R_i}{\partial x_i} - v_i^*(x_i, t) R_i \right) - \frac{\partial R_i}{\partial t} = -Q^* \quad (2.65)$$

в области Ω_T с условиями

$$R|_{t=0} = R_0(x_1, x_2, x_3), \quad (2.66)$$

$$B_{i1}R = 0, \quad x_i = a_i, \quad t > 0, \quad (2.67)$$

$$B_{i2}R = 0, \quad x_i = b_i, \quad t > 0. \quad (2.68)$$

Здесь $Q^* = Qe^{-\lambda t}/n(t)$, $R_0 = C_0$.

1) Пусть $Q = 0$ и выполнено (2.56). Представим $R(x_1, x_2, x_3, t)$ в виде:

$$R(x_1, x_2, x_3, t) = \prod_{i=1}^3 R_i(x_i, t) \quad (2.69)$$

где $R_i(x_i, t)$ – решение задачи (2.58) – (2.61) при $R_{i0}(x_i) = C_{i0}(x_i)$. Подставим (2.69) в (2.65) – (2.68):

$$L^*R = R_2R_3LR_1 + R_1R_3LR_2 + R_1R_2LR_3, \quad (2.70)$$

$$B_{i1}R = R_jR_kB_{i1}R_i, \quad x_i = a_i, \quad t > 0, \quad (2.71)$$

$$B_{i2}R = R_jR_kB_{i2}R_i, \quad x_i = b_i, \quad t > 0, \quad (2.72)$$

где $i, j, k = 1, 2, 3; j \neq i, j \neq k, i \neq k$.

Поскольку $R_i(x_i, t)$ – решения задачи (2.58) – (2.61), то соотношения (2.70) – (2.72) обращаются в тождества. При этом, очевидно, удовлетворяются начальные условия (2.66). Учитывая (2.64) и (2.69), убеждаемся в справедливости формулы (2.62).

2) Пусть $C_0 = 0$ и выполнено (2.57). Рассмотрим вспомогательную задачу относительно $R_m(x_1, x_2, x_3, t)$, аналогичную (2.65) – (2.68) с $Q^* = 0$ и $R_m(x_1, x_2, x_3, 0) = q_1(x_1)q_2(x_2)q_3(x_3)$. В соответствии с п. 1 настоящего доказательства ее решение дается формулой

$$R_m(x_1, x_2, x_3, t) = C_1(x_1, t)C_2(x_2, t)C_3(x_3, t). \quad (2.73)$$

Выражение $R_m(x_1, x_2, x_3, t - \tau)$ представляет собой функцию влияния мгновенного источника, действовавшего в момент времени τ . Распределение источника в области Ω характеризуется функциями $q_i(x_i)$. Влияние непрерывно действующего источника с переменной во времени интенсивностью $f(\tau) = e^{-\lambda\tau} q(\tau)/n(\tau)$ эквивалентно влиянию бесконечной последовательности возникающих на промежутке $(0, t]$ мгно-

венных источников той же геометрической формы, причем мощность мгновенного источника в момент τ равна $f(\tau)$. Суммарное влияние таких мгновенных источников определяется как интеграл

$$R(x_1, x_2, x_3, t) = \int_0^t f(\tau) R_m(x_1, x_2, x_3, t - \tau) d\tau. \quad (2.74)$$

Подставив выражение $f(\tau)$ в (2.74), приходим к формуле

$$R(x_1, x_2, x_3, t) = \int_0^t e^{\lambda\tau} \frac{q_t(\tau)}{n(\tau)} C_1(x_1, t - \tau) C_2(x_2, t - \tau) C_3(x_3, t - \tau) d\tau, \quad (2.75)$$

откуда с учетом (2.64) получаем (2.63).

Согласно [43, 70], решение задачи (2.52) – (2.55) при $Q \neq 0$ и $C_0 \neq 0$ можно записать в виде суперпозиции решений (2.62) и (2.63). Случай двух пространственных переменных рассматривается аналогично. В отличие от [25, 73, 74], описанный способ получения решений учитывает: 1) факторы конвекции и распада; 2) зависимость коэффициентов уравнения и граничных условий от времени; 3) наличие внутренних источников. Кроме того, возможно получить решение в том случае, если не удастся разделить переменные так, как это сделано в (2.56) и (2.57), но допустимо следующее представление

$$C_0(x_1, x_2, x_3) = C_{01}(x_1) C_{023}(x_2, x_3). \quad (2.76)$$

Допустим, найдены $C_1(x_1, t)$ – решение одномерной задачи с начальным условием $C_1(x_1, 0) = C_{01}(x_1)$ и $C_{23}(x_2, x_3, t)$ – решение двумерной задачи с начальным условием $C_{23}(x_2, x_3, 0) = C_{023}(x_2, x_3)$. На границах изменения переменных x_1, x_2, x_3 заданы однородные граничные условия. Тогда решение задачи (2.52) – (2.54), (2.76) при $Q = 0$ записывается в виде

$$C_0(x_1, x_2, x_3, t) = e^{-\lambda t} C_1(x_1, t) C_{23}(x_2, x_3, t). \quad (2.77)$$

Аналогично п. 2 доказательства этот результат переносится на случай неоднородного дифференциального уравнения.

Метод расщепления уравнения массопереноса при выполнении условий теоремы более удобен, чем традиционно применяемые методы интегральных преобразований. Он позволяет избежать двух- и трехкратного перехода к изображениям и взятия оригинала и дает возмож-

ность записывать решения пространственных задач, комбинируя решения одномерных задач. С помощью разработанного метода проще решаются задачи массопереноса в двух- и трехмерных областях фильтрации.

2.3.2 Аналитические модели массопереноса в двумерных областях фильтрации

Массоперенос радионуклида в полуограниченной плановой области (пласте-полуплоскости $x \geq 0$) в фильтрационном потоке, направленном к границе, и массообмене с пористой средой, протекающему по изотерме (2.7), описывается дифференциальным уравнением

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - \lambda n_e C + \frac{Q}{m_0} = n_e \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (2.78)$$

Здесь C – концентрация радионуклида (перенос продуктов его распада не рассматривается), остальные обозначения прежние. Начальные условия и плотность внутренних источников в виде прямоугольников определены аналогично (2.24), (2.25). Далее рассматривается перенос веществ к границе $x = 0$ ($v_x < 0$), на которой задано одно из условий:

$$D_x \frac{\partial C}{\partial x} = v_x (C - C_e), \quad (2.79)$$

$$D_x \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad v_x \neq 0, \quad (2.80)$$

$$D_x \frac{\partial C}{\partial x} + \alpha v_x C = 0, \quad v_x \neq 0, \quad (2.81)$$

соответствующих описанному в разделе 2.1 границам вида I, II и III. На бесконечно удаленных границах по координатам x и y принимаются условия (2.20).

Согласно теореме из раздела 2.3.1 при $C_e = 0$ решение уравнения (2.78) при одном из условий (2.79) – (2.80) записывается в виде

$$C(x, y, t) = e^{-\bar{\lambda}t} C_x(x, t) C_y(y, t) + \frac{q_0 t}{nm_0} \int_0^1 \bar{q}(t(1-\theta)) e^{\bar{\lambda}\theta} C_x(x, t\theta) C_y(y, t\theta) d\theta. \quad (2.82)$$

Здесь $C_x(x, t)$ – решения краевых задач в области $x \geq 0$:

$$D_x \frac{\partial^2 C_x}{\partial x^2} + v_x^* \frac{\partial C_x}{\partial x} = \frac{\partial C_x}{\partial t}, \quad (v_x > 0); \quad (2.83)$$

$$C_x(x, 0) = \begin{cases} 1, & x_1 \leq x \leq x_2, \\ 0, & x < x_1 \vee x > x_2; \end{cases} \quad (2.84)$$

граничные условия для C_x при $x = 0$ и $x \rightarrow \infty$ те же, что и для C .

Функция $C_y(y, t)$ является решением следующей задачи:

$$D_y \frac{\partial^2 C_y}{\partial y^2} - v_y^* \frac{\partial C_y}{\partial y} = \frac{\partial C_y}{\partial t}, \quad (2.85)$$

$$C_y(y, 0) = \begin{cases} 1, & y_1 \leq y \leq y_2, \\ 0, & y < y_1 \vee y > y_2; \end{cases} \quad (2.86)$$

граничные условия для C_y при $y \rightarrow \infty$ того же вида, что и для C .

Решение уравнения (2.78) при одном из условий (2.79) – (2.81) удобно провести методом преобразования Лапласа [21, 25, 33, 66], при этом следует принять $C_e = 0$. Для условия (2.81) при скорости, направленной внутрь области фильтрации, можно воспользоваться результатом [48], который приводится ниже при решении пространственных задач в разделе 2.3.3 (переменную z следует заменить на x , а v_x взять с противоположным знаком). В случае скорости фильтрации, направленной к границе, используется подстановка

$$C_x(x, t) = \exp(-P_x x - P_x^2 D_x^* t) \varphi(x, t), \quad P_x = v_x^* / 2D_x^*, \quad (2.87)$$

в результате чего можно перейти от (2.83), (2.84) к задаче

$$D_x^* \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (2.88)$$

$$\varphi(x,0) = \begin{cases} \exp(P_x x), & x_1 \leq x \leq x_2, \\ 0, & x < x_1 \vee x > x_2. \end{cases} \quad (2.89)$$

Условия (2.79) – (2.81) преобразуются соответственно к виду

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} - 3P_x \varphi = 0, \quad (2.90)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} - P_x \varphi = 0, \quad (2.91)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} - (2\alpha - 1)P_x \varphi = 0. \quad (2.92)$$

Дальнейшее изложение проведено для условия (2.90), а задачи с условиями (2.91) и (2.92) решаются аналогично. Функция $\varphi(x,t)$, определенная по (2.88) – (2.89), удовлетворяет условиям применимости преобразования Лапласа. Поскольку начальные условия кусочно-непрерывны, то переходим к следующей системе уравнений относительно изображений:

$$\begin{cases} D_x^* \Phi_1'' - p\Phi_1 = 0, & 0 \leq x \leq x_1, \\ D_x^* \Phi_2'' - p\Phi_2 + \exp(P_x x) = 0, & x_1 \leq x \leq x_2, \\ D_x^* \Phi_3'' - p\Phi_3 = 0, & x > x_2, \end{cases} \quad (2.93)$$

где $\Phi_i(p, x)$, $i=1,2,3$ – изображения Лапласа функции $\varphi(x,t)$ для трех промежутков $[0, x_1]$, $[x_1, x_2]$ и $[x_2, \infty)$. На их границах формулируются вытекающие из физического смысла задачи условия равенства функции и ее градиента, которые однозначно определяют изображение на всем интервале $[0, \infty)$.

$$\begin{cases} \Phi_1' - 3P_x \Phi_1 = 0, & x = 0, \\ \Phi_1 = \Phi_2, \Phi_1' = \Phi_2', & x = x_1, \\ \Phi_2 = \Phi_3, \Phi_2' = \Phi_3', & x = x_2, \\ \Phi_3' - P_e \Phi_3 = 0, & x \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (2.94)$$

Общее решение системы (2.93) имеет вид

$$\begin{cases} \Phi_1 = Ae^{-\xi x} + Be^{\xi x}, & 0 \leq x \leq x_1, \\ \Phi_2 = Fe^{-\xi x} + Ge^{\xi x} + J, & x_1 \leq x \leq x_2, \\ \Phi_3 = He^{-\xi x} + Me^{\xi x}, & x > x_2, \end{cases} \quad (2.95)$$

где $\xi = \sqrt{\frac{p}{D_x^*}}$, $J = \frac{\exp(P_x x)}{(\xi^2 - P_x^2)D_x^*}$, A, B, F, G, H, M – неизвестные постоянные. Подставляя (2.95) в (2.94), можно получить систему уравнений для определения этих констант

$$\begin{cases} -A\xi + B\xi - 3P_x \cdot A - 3P_x \cdot B = 0, \\ Ae^{-\xi x_1} + Be^{\xi x_1} - Fe^{-\xi x_1} - Ge^{\xi x_1} = J, \\ -Ae^{-\xi x_1} + Be^{\xi x_1} + Fe^{-\xi x_1} - Ge^{\xi x_1} = P_x J / \xi, \\ Fe^{-\xi x_2} + Ge^{\xi x_2} - He^{-\xi x_2} - Me^{\xi x_2} = -J, \\ -Fe^{-\xi x_2} + Ge^{\xi x_2} + He^{-\xi x_2} - Me^{\xi x_2} = -P_x K / \xi, \\ M(\xi - P_x) \lim_{x \rightarrow +\infty} e^{\xi x} = 0. \end{cases} \quad (2.96)$$

Решение системы (2.96) записывается в виде.

$$A = \frac{(\xi + 3P_x)}{2D_x^*(\xi - P_x)(\xi + 3P_x)} \{ \exp((P_x - \xi)x_1) - \exp((P_x - \xi)x_2) \},$$

$$B = \frac{1}{2D_x^*(\xi - P_x)} \{ \exp((P_x - \xi)x_1) - \exp((P_x - \xi)x_2) \},$$

$$F = A - \frac{\exp((P_x + \xi)x_1)}{2D_x^*(\xi + P_x)}, \quad G = -\frac{\exp((P_x + \xi)x_2)}{2D_x^*(\xi + P_x)},$$

$$H = A + \frac{\exp((P_x + \xi)x_2) - \exp((P_x + \xi)x_1)}{2D_x^*(\xi + P_x)},$$

$M = 0$ в силу требования ограниченности решения при $x \rightarrow \infty$. Оригиналы φ_i для изображений Φ_i находятся по таблицам [21]; при этом $\varphi_1(x, t) \equiv \varphi_2(x, t) \equiv \varphi_3(x, t)$. Окончательное выражение для C_x с учетом (2.87) имеет вид [52]:

$$C_x(x,t) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc}(\mu_{1,x} - w_x) - \operatorname{erfc}(\mu_{2,x} - w_x) - \frac{1}{2} \exp(-4w_x \zeta) \times \right. \\ \left. \times \{ \operatorname{erfc}(\mu_{3,x} - w_x) - \operatorname{erfc}(\mu_{4,x} - w_x) \} - \frac{3}{2} \exp(8w_x^2 + 4w_x \zeta) \times \right. \\ \left. \times \{ \exp(8w_x \zeta_1) \operatorname{erfc}(\mu_{3,x} + 3w_x) - \exp(8w_x \zeta_2) \operatorname{erfc}(\mu_{4,x} + 3w_x) \} \right\}, \quad (2.97)$$

где

$$\mu_{1,x} = g_x(x_1 - x), \mu_{2,x} = g_x(x_2 - x), \mu_{3,x} = g_x(x_1 + x), \mu_{4,x} = g_x(x_2 + x), \\ \zeta = xg_x, \zeta_1 = x_1g_x, \zeta_2 = x_2g_x, g_x = \frac{1}{2\sqrt{D_x^*t}}, w_x = \frac{v_x^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_x^*}}.$$

Для условия (2.80) первое уравнение системы запишется так:

$$-A\xi + B\xi - P_x A - P_x B = 0,$$

остальные останутся без изменений. Окончательное выражение для C_x в этом случае записывается в виде [52]

$$C_x(x,t) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc}(\mu_{1,x} - w_x) - \operatorname{erfc}(\mu_{2,x} - w_x) + \exp(4w_x \zeta) \times \right. \\ \left. \times \{ \operatorname{erfc}(\mu_{3,x} + w_x) - \operatorname{erfc}(\mu_{4,x} + w_x) \} \right\}. \quad (2.98)$$

При условии (2.81) выражение для C_x записывается в виде [55]

$$C_x(x,t) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc}(\mu_{1,x} - w_x) - \operatorname{erfc}(\mu_{2,x} - w_x) + \frac{1-\beta}{1+\beta} \exp(-4w_x \zeta) \times \right. \\ \left. \times \{ \operatorname{erfc}(\mu_{3,x} - w_x) - \operatorname{erfc}(\mu_{4,x} - w_x) \} - \frac{2\beta}{1-\beta} \exp(-4w_x \zeta) \times \right. \\ \left. \times \{ \exp(-(\mu_{3,x} - w_x)^2 + u_1) \operatorname{erfc}(u_1) - \exp(-(\mu_{4,x} - w_x)^2 + u_2) \operatorname{erfc}(u_2) \} \right\}. \quad (2.99)$$

Здесь $u_1 = (\mu_{3,x} - \beta w_x)$, $u_2 = (\mu_{4,x} - \beta w_x)$, $\beta = 2\alpha - 1$.

Решение краевой задачи (2.85), (2.86) получено методом источников

$$C_y(y, t) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc}(\mu_{1,y} - w_y) - \operatorname{erfc}(\mu_{2,y} - w_y) \right\}, \quad (2.100)$$

где обозначения $\mu_{1,y}$, $\mu_{2,y}$, w_y аналогичны принятым ранее для C_x .

Решения уравнения (2.78) при $C_e > 0$ получим по формуле (2.82), принимая $q_0 = -\lambda C_e$, $C_0 = 0$, $x_1 = 0$, $x_2 = +\infty$, $y_1 = -\infty$, $y_2 = +\infty$. Тогда в правой части этой формулы появится дополнительное слагаемое $C_e(1 - \kappa(x, y, t))$, где $\kappa(x, y, t) = 1 - e^{-\bar{\lambda}}$ для условия (2.80),

$$\kappa(x, y, t) = \bar{\lambda} \int_0^1 e^{-\bar{\lambda}} C_{x,0}(x, t\theta) d\theta \quad \text{для условия (2.79); } C_{x,0}(x, t\theta) \text{ получено из}$$

C_x при $x_1 = 0$, $x_2 \rightarrow +\infty$. Задачу с условием (2.81) можно решить методом расщепления только при $C_e = 0$.

Изложенным выше способом выводятся решения задач массопереноса в области $\{x \geq 0, y \geq 0\}$ (пласт-квадрант) при условиях (2.79) – (2.81) при $x = 0$ и $y = 0$, когда фильтрационный поток направлен в сторону границ: $v_y < 0$ в (2.85). Тогда в качестве C_y используются выражения для C_x , полученные заменой x на y при соответствующих граничных условиях. Решение задачи в этой области аналогично (2.82), а дополнительное слагаемое имеет вид

$$\kappa(x, y, t) = \bar{\lambda} \int_0^1 e^{-\bar{\lambda}} C_{x,0}(x, t\theta) C_{y,0}(y, t\theta) d\theta,$$

где $C_{y,0}$ получена из C_y при $y_1 = 0$, $y_2 \rightarrow +\infty$.

2.3.3 Аналитические модели массопереноса в трехмерных областях фильтрации

Массоперенос в пространственной области при осредненных параметрах процесса описывается уравнением

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} - \lambda n_e C + \frac{Q}{m_0} = n_e \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (2.101)$$

в котором приняты обозначения из раздела 2.3.2.

Областью изменения переменных x и y является: а) неограниченная плоскость; б) полуплоскость $x \geq 0$; в) квадрант $x \geq 0, y \geq 0$. В случае «а» при $x \rightarrow \pm\infty, y \rightarrow \pm\infty$ задаются условия (2.20). В случае «б» v_x входит в (2.101) с противоположным знаком, а при $x = 0$ задано одно из условий (2.79) – (2.81), а при $x \rightarrow +\infty, y \rightarrow \pm\infty$ – условие (2.20). В случае «в» v_x и v_y входят в (2.101) с противоположным знаком; на границах области по x и y задано одно из условий (2.79) – (2.81), при $x \rightarrow +\infty, y \rightarrow +\infty$ – условия (2.20).

При моделировании массопереноса в верхней части водоносного пласта большой мощности влиянием нижней границы, особенно на начальных стадиях процесса, можно пренебречь. Тогда допустимо рассматривать перенос в полуограниченной по вертикали области ($0 \leq z < \infty$), причем ось Oz направлена вниз. На кровле водоносного горизонта ($z = 0$) ставится условие

$$D_z \frac{\partial C}{\partial x} = v_z (C - C_\Gamma), \quad (2.102)$$

учитывающее как конвективный, так и диффузионный поток через эту границу; при отсутствии поверхностных источников $C_\Gamma = C_e$.

На большой глубине ($z \rightarrow \infty$) градиент концентрации принимается равным нулю

$$\frac{\partial C}{\partial z} = 0. \quad (2.103)$$

При моделировании массопереноса в водоносном горизонте небольшой мощности m_0 , залегающем на плотном глинистом водоупоре, согласно положениям гидравлической теории фильтрации принимается $v_z = 0$. Условие (2.102) при $z = 0$ формально переходит в (2.103). На границе $z = m_0$ учитывается отвод вещества за пределы области путем сорбции в верхнем слое водоупора толщиной l со скоростью β , а условие имеет вид (2.21).

Функции C_0 и Q задаются аналогично (2.26), (2.27):

$$C_0(x, y, z) = \begin{cases} C_0 + C_e, & (x, y, z) \in \Omega_0 \times [z_1, z_2], \\ C_e, & (x, y, z) \notin \Omega_0 \times [z_1, z_2]; \end{cases} \quad (2.104)$$

$$Q_{j,0}(x, y, z, t) = \begin{cases} q_0 \bar{q}(t), & (x, y, z) \in \Omega_q \times [z_1, z_2], \\ 0, & (x, y, z) \in \Omega_q \times [z_1, z_2]; \end{cases} \quad (2.105)$$

где Ω_q и Ω_0 определяются по (2.28), (2.29).

Согласно теореме из раздела 2.3.1 решение уравнения (2.101) при условиях (2.79) – (2.81) и (2.102) – (2.103), (2.21) при $C_e = 0$ записывается в виде

$$C(x_1, x_2, x_3, t) = e^{-\bar{\lambda}t} C_{xy}(x, y, t) C_z(z, t) + \\ + \frac{q_0 t}{n_e} \int_0^1 \bar{q}(t(1-\theta)) e^{-\bar{\lambda}t\theta} C_{xy}(x, y, t\theta) C_z(z, t\theta) d\theta, \quad (2.106)$$

Функция $C_{x,y}(x, y, t)$ удовлетворяет уравнению (2.78), начальному условию

$$C_{xy}(x, y, 0) = \begin{cases} 1, & (x, y) \in \Omega_0, \\ 0, & (x, y) \notin \Omega_0, \end{cases} \quad (2.107)$$

и граничным условиям, аналогичным для C по соответствующим переменным.

Конкретные выражения для C_{xy} могут быть взяты из приведенных в разделе 2.3.2 решений в зависимости от вида граничных условий. Для Ω_0 и Ω_q , заданных в виде прямоугольников, можно разделить переменные x и y и воспользоваться различными комбинациями (2.97) – (2.100) с соответствующей заменой в индексах x на y . Для Ω_0 и Ω_q , заданных в виде многоугольника в неограниченной области, не удастся разделить переменные в функциях, которые соответствуют начальному условию или участку поступления вещества. Решение двумерной задачи, полученное ранее при $\lambda = 0$, может быть использовано в формуле (2.106).

Функция C_z определяется как решение уравнения

$$D_z^* \frac{\partial^2 C_z}{\partial z^2} - v_z^* \frac{\partial C_z}{\partial z} = \frac{\partial C_z}{\partial t} \quad (2.108)$$

при начальном условии

$$C_z(z,0) = \begin{cases} 1, & z \in [z_1, z_2], \\ 0, & z \notin [z_1, z_2]; \end{cases} \quad (2.109)$$

и граничных условиях (2.102) – (2.103), (2.21), при $C_e=0$.

Решения этих задач C_z известны и могут быть записаны в виде:

а) для области $0 \leq z \leq \infty$ [48]

$$C_z(z,t) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc}(\mu_{1,z} + w_z) - \operatorname{erfc}(\mu_{2,z} + w_z) + \exp(-w_z \zeta) \times \right. \\ \times \left\{ (1 + 4w_z^2 + 4w_z \mu_{3,z}) \operatorname{erfc}(\mu_{3,z} + w_z) - \frac{4w_z}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-(\mu_{3,z} + w_z)^2\right) - \right. \\ \left. - (1 + 4w_z^2 + 4w_z \mu_{4,z}) \operatorname{erfc}(\mu_{4,z} + w_z) - \frac{4w_z}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-(\mu_{4,z} + w_z)^2\right) \right\} \left. \right\}; \quad (2.110)$$

где

$$\mu_{1,z} = g_z(z_1 - z), \mu_{2,z} = g_z(z_2 - z), \mu_{3,z} = g_z(z_1 + z), \mu_{4,z} = g_z(z_2 + z),$$

$$\zeta = z g_z, \quad g_z = \frac{1}{2\sqrt{D_z^* t}}, \quad w_z = \frac{v_z^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_z^*}}, \quad v_z^* = \frac{v_z}{n_e}, \quad D_z^* = \frac{D_z}{n_e};$$

б) для области $0 \leq z \leq m_0$ [25]

$$C_z(z,t) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left\{-D_z^* \alpha_n^2 t\right\} \frac{(\xi^2 + \alpha^2) \cos(\alpha_n z)}{(\xi^2 + \alpha^2)L + \xi} F_n, \quad (2.111)$$

$$F_n = \int_0^{m_0} f_z(z) \cos(\alpha_n z) dz = \frac{\sin(\alpha_n z_2) - \sin(\alpha_n z_1)}{\alpha_n}, \quad \xi = \frac{\beta l}{D_z}, \quad D_z^* = \frac{D_z}{n_e};$$

α_n – положительные корни характеристического уравнения $\alpha \tan(\alpha m_0) = \xi$.

Решение уравнения вертикального переноса при условии (2.102) на верхней границе $z=0$ приведено в [122]

$$C_z(z,t) = \frac{2g_z}{\sqrt{\pi}} \exp\left\{-4(\zeta - w_z)^2\right\} - P_z \exp(P_z z) \operatorname{erfc}(\zeta + w_z), \quad (2.112)$$

где $P_z = v_z/2D_z$.

Решения уравнения (2.101) при $C_e > 0$ получим по формуле (2.106) аналогично двумерным выражениям из раздела 2.3.2. В правой части (2.106) появится дополнительное слагаемое $C_e(1 - \kappa(x, y, z, t))$, где

$$\kappa(x, y, z, t) = 1 - e^{-\bar{\lambda}} \text{ для условия (2.80),}$$

$$\kappa(x, y, z, t) = \bar{\lambda} \int_0^1 e^{-\bar{\lambda}\theta} C_{xy,0}(x, y, t\theta) C_{z,0}(z, t\theta) d\theta \text{ в остальных случаях;}$$

$C_{xy,0}$ и $C_{z,0}$ получены из C_{xy} и C_z аналогично рассмотренному выше двумерному случаю.

Приведенные выше примеры использования метода расщепления показывают, что он может успешно применяться для решения задач в областях различной геометрической формы при сохранении ими канонического вида. Структура формул (2.82), (2.106) остается неизменной, а вид входящих в нее одномерных решений определяется в зависимости от постановки задачи и граничных условий.

2.3.4 Расчет массопотока через границу области фильтрации

Основной характеристикой поступления веществ в поверхностные воды с подземным стоком является величина массопотока Ψ , равная количеству растворенного радионуклида, переносимого с потоком жидкости через единицу поперечного сечения за единицу времени, Бк/(м²·сут). Для двумерных задач в каждой точке границы полуплоскости $x \geq 0$ в момент времени t с учетом осреднения концентрации C по вертикали в пласте толщиной m_0 согласно (2.1)

$$\Psi(y, t) = m_0 \left(-D_x \frac{\partial C}{\partial x} + v_x C \right) \Big|_{x=0}. \quad (2.113)$$

Если на границе $x = 0$ задано условие (2.79), то диффузионная и конвективная составляющие массопотока отличны от нуля. Если выполняется условие (2.80), то поток вещества обусловлен только конвекцией. При условии (2.81) конвективный поток вещества через границу $x = 0$ меньше по сравнению с предыдущим случаем за счет частичного испарения вытекающей воды. Подстановка соотношений (2.79) и (2.80) в (2.113) дает удобную формулу для расчета массопотока

$$\Psi(y, t) = a v_x m_0 C(0, y, t), \quad (2.114)$$

где $a = 2$ для условия (2.79); $a = 1$ для условия (2.80), $a = 1 - \alpha$ для условия (2.81).

Общее количество вещества, выносимого в момент t из области с фильтрационным потоком через всю границу, определяется как интеграл вдоль границы

$$\Psi_{\Gamma}(t) = a |v_x| m_0 \int_{-\infty}^{+\infty} C(0, y, t) dy, \quad (2.115)$$

а количество вещества, вынесенного из области за промежуток $[t_1, t_2]$, как двойной интеграл

$$\Psi_{\Gamma, t} = a |v_x| m_0 \int_{t_1 - \infty}^{t_2 + \infty} \int C(0, y, t) dy dt. \quad (2.116)$$

Если область массопереноса представляет собой в плане положительный квадрант, то массопоток через разные участки границы определяется по формулам

$$\Psi(y, t) = a v_x m_0 C(0, y, t), \quad 0 < y < +\infty; \quad (2.117)$$

$$\Psi(x, t) = a v_y m_0 C(x, 0, t), \quad 0 < x < +\infty. \quad (2.118)$$

Суммарный массопоток через всю границу квадранта составит

$$\Psi_{\Gamma}(t) = a m_0 \left(|v_x| \int_0^{+\infty} C(0, y, t) dy + |v_y| \int_0^{+\infty} C(x, 0, t) dx \right). \quad (2.119)$$

Общая активность радионуклида, вынесенного с фильтрационным потоком из области за промежуток времени $[t_1, t_2]$, определяется по формуле

$$\Psi_{\Gamma}(t) = a m_0 \int_{t_1}^{t_2} \left(|v_x| \int_0^{+\infty} C(0, y, t) dy + |v_y| \int_0^{+\infty} C(x, 0, t) dx \right) dt. \quad (2.120)$$

Массопоток через подошву водоносного горизонта конечной мощности, залегающего на глинистом водоупоре, обусловлен диффузией и

сорбцией в верхнем слое водоупорных пород, что отражается условием (2.21). Интенсивность суммарного потока вещества в этом случае определяется по формуле

$$\Psi_{\Xi}(t) = -D_z \int_{\Xi} \frac{\partial C(x, y, m_0, t)}{\partial z} d\Xi, \quad (2.121)$$

где Ξ – двумерная в плане область интегрирования (плоскость, полуплоскость или квадрант).

Массу вещества, поступившего через подошву водоносного горизонта в течение промежутка времени $[t_1, t_2]$, можно рассчитать как интеграл

$$\Psi_{\Xi, t} = -D_z \int_{t_1}^{t_2} \int_{\Xi} \frac{\partial C(x, y, m_0, t)}{\partial z} d\Xi dt. \quad (2.122)$$

Разработанный комплекс аналитических моделей массопереноса радионуклидов в подземных водах позволяет:

1) последовательно определять концентрации мигрирующих веществ, начиная с момента их поступления в породы зоны аэрации до выноса в поверхностные водоемы (водотоки);

2) учитывать важные для практики особенности фильтрационных течений: размерность области потока, различные типы границ, межслоевой обмен, изменчивость поля скоростей в пространстве и времени;

3) обеспечивать высокую вычислительную точность с помощью разработанных алгоритмов интегрирования и современных средств компьютерной математики;

4) адекватно учитывать форму, вид проявления и интенсивность источников поступления радиоактивных веществ в водоносные горизонты без искусственной сеточной дискретизации области фильтрации.

2.4. Учет неоднородностей при использовании аналитических моделей

Одним из основных ограничений на применение аналитических методов моделирования является неоднородность области подземного массопереноса. При выполнении прогнозов в рамках мониторинга под-

земных вод необходимо учитывать следующие виды неоднородности: 1) слоистую, определяемую чередованием отложений пород с различной проницаемостью и емкостными свойствами, 2) плановую, связанную с изменениями по площади свойств пород, мощностей проницаемых и водоупорных пород, а также зоны аэрации, 3) хаотическую (стохастическую), обусловленную неупорядоченными включениями различного масштаба и проницаемости. Кроме того, должны адекватно отражаться пространственно-временные изменения поля скоростей фильтрации.

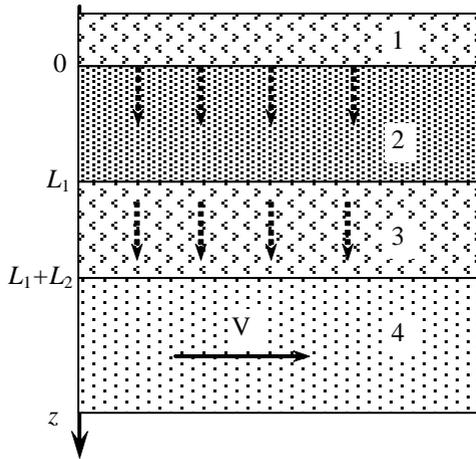
Для учета слоистой неоднородности можно применить способ [122], основанный на следующем допущении: массоперенос в каждом залегающем ниже слое (рис. 2.2а) не оказывает влияние на перенос веществ в расположенных выше слоях пород. Допущение справедливо, в частности, в условиях нисходящего потока влаги в зоне аэрации над уровнем грунтовых вод.

Интенсивность поступления вещества в водоносный горизонт через слоистую толщу грунтов определяется следующим образом. Сначала последовательно вычисляется концентрация на нижней границе каждого залегающего сверху слоя без учета влияния подстилающего слоя. Для этого может быть использовано, например, одно из решений задачи одномерного нестационарного массопереноса с заданной на входе концентрацией [14]. Например, изменяющаяся во времени концентрация $C_2(L_1, t)$ на выходе из слоя «2» рассматривается как заданная на входной верхней границе слоя «3». Тогда

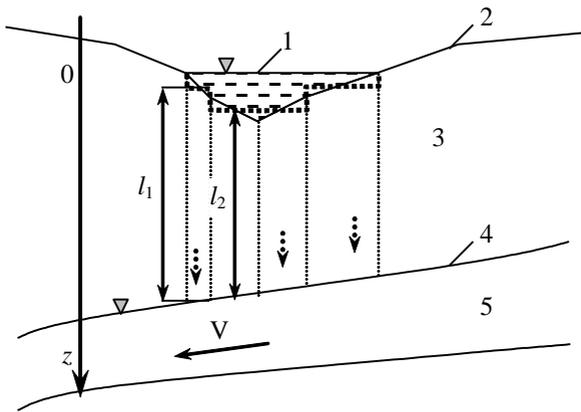
$$C_3(z, t) = \int_0^t \tilde{N}_2(L_1, \tau) \frac{\partial G_3}{\partial t}(z - L_1, t - \tau) d\tau, \quad L_1 < z < L_1 + L_2, \quad (2.123)$$

где функция G_3 имеет вид, аналогичный C_2 , но взята с соответствующими параметрами для слоя «3». Интенсивность поступления вещества в горизонтальный поток определяется по его концентрации на выходе из этого слоя $C_3(L_2, t)$.

Предложенный подход детально рассмотрен в примере 7 раздела 3.4. Вместо формул расчета концентрации в полуограниченной области могут использоваться расчетные соотношения для ограниченных областей, учитывающие влияние подстилающих слоев [30, 33, 47]. Однако они более громоздкие и дают близкие численные результаты.



а)



б)

- Рис. 2.2. Схематизация вертикального массопереноса:
- а) в слоистой толще пород (1 – слой РАО, 2, 3 – слои пород различной проницаемости, 4 – водоносный горизонт);
 - б) при переменной мощности зоны аэрации (1 – хвостохранилище или слой РАО, 2 – поверхность земли, 3 – зона аэрации, 4 – уровень грунтовых вод, 5 – водоносный горизонт).

Для учета переменной в плане мощности зоны аэрации область, занимаемая источником поступления веществ, разбивается на участки, в пределах которых принимается квазистационарный уровень залегания грунтовых вод (рис.2.2б). Различное высотное положение участков может быть связано, например, с рельефом дна хвостохранилищ, неодинаковым заглублением захоронений РАО, частично с наклоном поверхности грунтовых вод. На каждом i -м участке нисходящий массоперенос моделируется независимо, аналогично описанной выше схеме для слоистой зоны аэрации мощностью l_i .

В общем случае для моделирования массопереноса в переменном поле скоростей фильтрации применяются численные алгоритмы. Достаточно эффективным способом выполнения прогнозов является расчет миграции с помощью аналитических зависимостей вдоль линий тока. Это позволяет, с одной стороны, учесть особенности течения подземных вод, с другой – избежать искусственной дискретизации области и связанных с этим погрешностей.

Большинство аналитических решений задач массопереноса получено при постоянной или специальным образом изменяющейся скорости фильтрации v [14, 45, 47]. Для расчета миграции допустимо усреднить скорость v на участке длиной $L(T)$ вдоль линии тока, который будет пройден фронтом растворенного вещества к моменту T

$$v_s = \frac{1}{L(T)} \int_0^{L(T)} v(S) dS. \quad (2.124)$$

Длину L можно уточнить, приняв во внимание неравномерность распределения концентрации вдоль линии тока в переходной зоне. Расчет на период T выполняется для совокупности прямоугольных и многоугольных источников (раздел 2.2), причем для каждого из них используется свое значение скорости фильтрации v_s .

Корректность такого подхода была подтверждена с помощью стандартных средств системы компьютерной математики Maple 8. В ходе расчетов были построены профили концентрации по аналитической зависимости с осредненной скоростью v_s и конечно-разностным методом на мелкой сетке при переменной скорости $v(s)$. Установлено, что в характерном для осадочных пород диапазоне скорости фильтрации расхождения в положении фронта вещества не превышают 5 – 10% от длины участка, пройденного веществом за период прогноза 40 – 50 лет. Эта ошибка существенно ниже общепринятой точности определения

миграционных параметров, что позволяет применять предлагаемый подход для решения практических задач.

При выполнении расчетов участки неправильной формы аппроксимируются прямоугольными или многоугольными площадными источниками, причем степень детализации определяется изменчивостью поля скоростей. Концентрация вещества вычисляется на основе аналитических решений задач двух- и трехмерного нестационарного массопереноса в однонаправленном потоке с внутренним площадным или объемным источником. Линия тока для каждого элементарного участка строится, начиная от его центра, а среднее направление скорости на интервале времени $[0, T]$ определяется аналогично формуле (2.124). Прогнозируемая концентрация в горизонтальном плановом потоке рассчитывается как сумма концентраций, определенных для всех участков.

Такой подход учитывает пространственную изменчивость скорости фильтрации, продольной и поперечной дисперсии, сорбционных параметров, интенсивности поступления вещества в горизонтальный поток. Последний параметр зависит от проницаемости, сорбционных свойств и толщины слоя пород, подстилающих хранилище отходов. При расчете необходимо учитывать, что средняя скорость v_s для каждого элемента должна определяться для каждого периода времени T с учетом положения линий тока и свойств горных пород.

Практическое применение предложенного подхода к учету плановой неоднородности и переменной скорости фильтрации рассмотрено в разделе 3.6.

Стохастическая неоднородность приводит к большому разбросу значений концентрации в близкостоящих контрольных точках. При этом основной массопоток проходит через зоны с повышенной проницаемостью, которые занимают небольшую часть общего объема пород.

Предлагаемый способ учета такой неоднородности позволяет с помощью аналитических моделей оценить влияние зон различной проницаемости и сорбционной емкости на диапазон оцениваемой концентрации, что является предпочтительнее простого осреднения параметров, часто используемого в миграционных расчетах. Для этого используются распределенные параметры, характеризующие проницаемость и емкостные свойства горных пород. Подобные подходы применялись при моделировании рассеяния примеси в приземном слое атмосферы [59] и миграции растворов в нарушенном трещиноватом массиве горных пород [60].

Далее рассматривается массоперенос в макронеоднородных осадочных породах в случае, когда затруднительно выделить закономерности изменения их свойств в плане или в пространстве.

Пусть $p_v(\xi)$, $p_D(\xi)$, $p_{ne}(\eta)$ – плотности распределения скорости фильтрации, гидродисперсии и параметра сорбции в области массопереноса. Предполагается, что коэффициенты распределений p_v , p_D и p_{ne} оценены на основании данных мониторинга и анализа геологической информации. Распределение $p_D(\xi)$ может быть получено из $p_v(\xi)$, поскольку коэффициент гидродисперсии является функцией скорости фильтрации.

Пусть также C – концентрация радионуклида в поровом растворе, рассчитанная согласно соотношениям одной из моделей, представленных в разделах 2.2 и 2.3. Тогда для каждой точки области (x, y, z) в момент времени t можно определить математическое ожидание концентрации в виде

$$\begin{aligned} \bar{C}(x, y, z, t) = \\ = \int_{n_{e,\min}}^{n_{e,\max}} \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} C(x, y, z, t, D(\xi), v(\xi), n_e(\eta)) p_D(\xi) p_v(\xi) p_{n_e}(\eta) d\xi d\eta, \quad (2.125) \end{aligned}$$

причем интегрирование по плотностям распределений скорости и гидродисперсии подразумевает учет всех их компонент.

Таким образом, область массопереноса рассматривается как случайное поле с многомерными распределениями, а первый центральный момент характеризует среднеожидаемую концентрацию в контрольных точках. Аналогично можно определить численную дисперсию (разброс значений) концентрации относительно среднего значения в виде

$$\begin{aligned} DC(x, y, z, t) = \\ = \int_{n_{e,\min}}^{n_{e,\max}} \int_{v_{\min}}^{v_{\max}} \{\bar{C} - C(x, y, z, t, D(\xi), v(\xi), n_e(\eta))\}^2 p_D(\xi) p_v(\xi) p_{n_e}(\eta) d\xi d\eta. \quad (2.126) \end{aligned}$$

Значение DC количественно характеризует важный для моделирования и интерпретации его результатов фактор устойчивости (чувствительности) модели к ошибкам исходных данных. Следует отметить, что численное интегрирование выражений (2.125) и (2.126) по квадратурным формулам при использовании сложных расчетных схем, особенно для дочерних радионуклидов, связано с большим объемом вычислений.

Для практических целей достаточно оценить значения \bar{C} и $D C$ с помощью генерируемых ЭВМ псевдослучайных чисел, используя выборки объемом до нескольких сотен значений v, D, n_e .

3. ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ МАССОПЕРЕНОСА РАДИОНУКЛИДОВ

3.1. Оценка точности вычислительной реализации аналитических решений

Полученные аналитические решения являются точными для соответствующих краевых задач, при этом большинство их записано в квадратурах. Для выполнения расчетов по этим формулам могут использоваться системы компьютерной математики MathCad, Maple, Mathematica и др. Однако тестовые вычисления в этих программах показали, что используемые в их современных версиях алгоритмы интегрирования не позволяют проводить надежные расчеты миграции в диапазонах реального изменения параметров, особенно с увеличением кратности интегралов. Применение систем компьютерной математики представляется в большей степени целесообразным для тестирования специально разработанных алгоритмов численного интегрирования, которые учитывают свойства подинтегральных функций и обеспечивают высокую точность вычислений и удобство практического применения полученных решений.

От квадратурных и кубатурных формул численного интегрирования необходимо потребовать, чтобы они давали максимально высокую точность при минимально возможном объеме вычислений. Это обеспечивается: а) вычислением функции $\text{erf}(z)$, входящей в подинтегральные выражения, с помощью многочлена пятой степени с погрешностью не выше $1,5 \cdot 10^{-7}$ [69]; б) использованием квадратурных формул Гаусса наивысшей алгебраической степени точности [27], в) оптимальным размещением узлов на промежутке интегрирования. Кубатурные формулы интегрирования для областей более высокой размерности (например, квадрата), строятся путем «перемножения» квадратурных формул меньшей размерности (для отрезка).

Во всех полученных решениях отсутствуют особенности в подинтегральных выражениях, они являются непрерывными и гладкими для всех моментов времени $t > 0$. При численном интегрировании функций Φ , S , U_1 , V_1 , U_2 , V_2 (раздел 2.2) в соответствии с их свойствами по соотношениям между коэффициентами определяются те промежутки, на которых значения подинтегральной функции не превосходят некоторой малой величины ε . В дальнейшем эти промежутки исключаются из области интегрирования, что позволяет при более плотном размещении

узлов квадратурной формулы добиться большей точности и устойчивости счета при разных значениях параметров. При сужении области численного интегрирования погрешность вычислений не превышает εL , где L – суммарная длина отброшенных промежутков (площадь исключенных двумерных областей).

Рассмотрим применение изложенного подхода на примере вычисления интеграла из (2.39)

$$\int_0^1 e^{-\bar{\lambda}_1 \theta} \Phi(a_{1,x}, a_{2,x}, a_x, \theta) \Phi(a_{1,y}, a_{2,y}, a_y, \theta) d\theta, \quad (3.1)$$

$$\Phi(a_{1,x}, a_{2,x}, a_x, \theta) = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{a_{x,1}}{\sqrt{\theta}} - a_x \sqrt{\theta} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{a_{x,2}}{\sqrt{\theta}} - a_x \sqrt{\theta} \right) \right],$$

причем всегда $a_{1,x} > a_{2,x}$ и $a_{1,y} > a_{2,y}$, a_x и a_y – любого знака. Пусть $K > 0$ – такое число, что $1 - \operatorname{erf}(K) \leq \varepsilon$; $\varepsilon > 0$ – погрешность вычисления подынтегральной функции. Без ограничения общности считается, что $e^{-\bar{\lambda}_1 \theta} q(t(1-\theta)) \leq 1$. Условие $\Phi(a_{1,x}, a_{2,x}, a_x, \theta) < \varepsilon$ при фиксировании других параметров выполняется для тех θ , которые удовлетворяют условиям

$$\frac{a_{x,1}}{\sqrt{\theta}} - a_x \sqrt{\theta} < -K, \quad \frac{a_{x,2}}{\sqrt{\theta}} - a_x \sqrt{\theta} > K, \quad 0 \leq \theta \leq 1. \quad (3.2)$$

Решая систему неравенств (3.2) относительно $a_{1,x}$, $a_{2,x}$ и a_x , можно определить область $\Theta_x \subseteq [0,1]$ изменения θ , такую, что $\forall \theta \in \Theta_x$ выполняется $\Phi(a_{1,x}, a_{2,x}, a_x, \theta) > \varepsilon$. Аналогично можно получить отрезок $\Theta_y \subseteq [0,1]$. Тогда область изменения переменной интегрирования в (3.1) представляет собой как пересечение отрезков Θ_x и Θ_y .

При вычислении интеграла из (2.41) вида

$$\int_0^1 f(\omega) S(a_{1,x}, a_{2,x}, a_x) S(a_{1,y}, a_{2,y}, a_y) d\omega, \quad (3.3)$$

где без ограничения общности можно принять $f(\omega) \leq 1$, можно поступить следующим образом. Поскольку $S(a_{1,x}, a_{2,x}, a_x) \leq \varepsilon$ имеет место

при $\Phi(a_{1,x}, a_{2,x}, a_x \psi) \leq \varepsilon$, то промежуток интегрирования в (3.3) определяется из неравенств

$$\frac{a_{2,x} - K}{a_3} \leq \psi \leq \frac{a_{1,x} + K}{a_3}, \quad -K \leq \psi \leq K. \quad (3.4)$$

Такой же подход использован и при вычислении двойного интеграла от функции S . Подставляя вместо $a_{1,x}$, $a_{2,x}$, a_x , $a_{1,y}$, $a_{2,y}$ и a_y их выражения, можно получить систему неравенств, из которой определяются те промежутки изменения переменных интегрирования ω и θ , вне которых значения подынтегральных выражений меньше ε .

Для повышения точности вычислений по формулам (2.46) и (2.47) предлагается поступить следующим образом. С относительной погрешностью, не превышающей 2ε , выполняется приближенное равенство

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\gamma_{i+1}}^{\gamma_i} e^{-\xi^2} \operatorname{erf}(k_i \chi \xi + \rho_i - w_1) d\xi \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\gamma_{i+1,m}}^{\gamma_{i,m}} e^{-\xi^2} \operatorname{erf}(k_i \chi \xi + \rho_i - w_1) d\xi,$$

где $\gamma_{i,m} = \min(\gamma_i, K)$, $\gamma_{i,m+1} = \max(\gamma_{i+1}, -K)$. Кроме того, если для всех $\xi \in [\gamma_i, \gamma_{i+1}]$ выполняется $k_i \chi \xi + \rho_i - w_1 > K$, то с погрешностью, меньшей $\varepsilon(\gamma_i - \gamma_{i+1})$, имеет место

$$\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\gamma_{i+1}}^{\gamma_i} e^{-\xi^2} \operatorname{erf}(k_i \chi \xi + \rho_i - w_1) d\xi \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\gamma_{i+1}}^{\gamma_i} e^{-\xi^2} d\xi = \operatorname{erf}(\gamma_i) - \operatorname{erf}(\gamma_{i+1}).$$

Аналогично рассматривается случай, когда для всех $\xi \in [\gamma_i, \gamma_{i+1}]$ выполняется $k_i \chi \xi + \rho_i - w_1 < -K$. Это позволяет, не снижая точность вычислений, сузить отрезок численного интегрирования, аналитически определяя значения интеграла по выделяемым промежуткам. Такой же подход применим и в случае интегралов большей кратности.

Основные вычислительные трудности, возникающие при расчете по формулам (2.97) – (2.99), связаны с наличием в них дополнительных слагаемых, представляющих собой произведение двух сомножителей, один из которых стремится к $+\infty$, другой – к нулю при определенных значениях аргументов. Например, в (2.97) это член

$$\begin{aligned} & \exp(8w_x^2 + 4w_x\zeta + 8w_x\zeta_1) \operatorname{erfc}(\mu_{3,x} + 3w_x) = \\ & = \exp\left(\frac{2(v_x^*)^2 t}{D_x^*} + \frac{v_x^* x}{D_x^*} + \frac{2v_x^* x_1}{D_x^*}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x + x_1}{2\sqrt{D_x^* t}} + \frac{3v_x^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_x^*}}\right). \end{aligned} \quad (3.5)$$

При $x \rightarrow +\infty$ и $t \rightarrow \infty$ экспонента неограниченно возрастает, а значения функции erfc стремятся к нулю. Непосредственное вычисление таких слагаемых при указанных значениях аргументов приводит к существенным погрешностям получаемых результатов.

Для преодоления этих затруднений функцию $\operatorname{erfc}(u)$ можно представить в виде:

$$\operatorname{erfc}(u) = e^{-u^2} f(u) + \varepsilon(u), \quad (3.6)$$

где $f(u)$ определяется через многочлен пятой степени, ограниченный на $[0, +\infty)$, причем $\lim_{u \rightarrow +\infty} f(u) = 0$ [69]. Тогда (3.5) можно записать в виде:

$$\exp\left(-\frac{(x + x_1 - v_x^* t)^2}{4D_x^* t} - \frac{v_x^* x}{D_x^*}\right) e^{-u^2} \operatorname{erfc}(u), \quad u = \frac{x + x_1 + 3v_x^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_x^* t}}. \quad (3.7)$$

Выражение (3.7) уже не содержит неограниченно растущих при $x \rightarrow +\infty$ сомножителей. Аналогично рассматриваются подобные слагаемые в решениях (2.98), (2.99), (2.110) и (2.112). С увеличением u использование (3.6) может давать значительную погрешность, в таком случае применяется асимптотическое разложение $\operatorname{erfc}(u)$ при больших u [17], записанное как сумма ряда и не содержащее погрешности $\varepsilon(u)$.

Слагаемое из формулы (2.97), содержащее множитель $\exp(-4w_x\zeta_1)$, можно учитывать только для тех x , для которых $4w_x\zeta < L$, где L удовлетворяет неравенству $\exp(-L) < \varepsilon(x)$, $\varepsilon(x)$ – погрешность вычисления функции $\operatorname{erfc}(x)$. Таким же образом определяется область изменения x и t , в которой следует учитывать вклад слагаемых вида (3.7). Если же эти слагаемые входят в подынтегральное выражение в решении (2.82), то, используя принятый подход, можно локализовать интервалы Θ'_x и Θ''_x такие, что

$$\forall \theta \in \Theta'_x, \Theta'_x \subset [0, 1], \exp\left(-\frac{(x + x_1 - v_x^* t)^2}{4D_x^* t} - \frac{v_x^* x}{D_x^*}\right) > \varepsilon_{\max},$$

$$\forall \theta \in \Theta''_x, \Theta''_x \subset [0, 1], \left\{ \operatorname{erfc}\left(\frac{\mu_{3,x}}{\sqrt{\theta}} + w_x \sqrt{\theta}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{\mu_{4,x}}{\sqrt{\theta}} + w_x \sqrt{\theta}\right) \right\} > \varepsilon_{\max};$$

где $\varepsilon_{\max} = \max_x \{\varepsilon(x)\}$. Определенные таким образом интервалы Θ'_x и Θ''_x объединяются с полученным ранее отрезком Θ_x . Длина отрезка численного интегрирования $\Theta' = \Theta_x \cup \Theta'_x \cup \Theta''_x \cup \Theta_y$ может оказаться существенно меньше единицы, благодаря чему узлы квадратурной формулы оптимально размещаются на отрезке $[0, 1]$.

С использованием предложенной методики были разработаны алгоритмы численного интегрирования. Их тестирование проводилось с помощью систем Mathematica и Maple, которые позволяют производить вычисления с высокой точностью (относительная погрешность часто не превышает 10^{-16}). Сравнение результатов, полученных по стандартным процедурам и программам численного интегрирования, составленных автором, показало, что последние дают значения с относительной погрешностью, не превышающей 10^{-6} при использовании квадратурных формул Гаусса и Эрмита с 20 узлами. Близкий к этому порядок точности достигался и при использовании формул с 10 и 16 узлами, однако с увеличением компонент скорости v_x , v_y и времени t в отдельных точках области относительная погрешность возрастала до 10^{-4} . Протестированные алгоритмы численного интегрирования обеспечивают устойчивый счет и высокую точность для диапазонов изменения исходных данных, которые соответствуют их реальным значениям [6, 10, 14, 77].

На основе процедур численного интегрирования разработан комплекс программ, позволяющих выполнять: 1) прогноз миграции радионуклидов в плановых и пространственных фильтрационных потоках при поступлении в них РВ из могильников и хранилищ РАО; 2) прогноз поступления радионуклидов в поверхностные водоемы с подземным стоком. Рассматриваются источники прямоугольной и многоугольной формы с переменной во времени интенсивностью. Основные миграционные параметры выражаются через осредненные по области фильтрации величины.

Значения концентрации определяются с требуемой детальностью:

а) в фиксированной точке пласта при изменении времени; б) для пря-

моугольного участка плановой или пространственной области в фиксированный момент времени; в) вдоль любого профиля, задаваемого координатами крайних точек. Для полуограниченных областей дополнительно определяются: а) значения интенсивности массопотока через границу в заданном промежутке времени; б) суммарная масса (активность) вещества, вынесенного с фильтрационным потоком через границу области в течение заданного промежутка времени.

3.2. Влияние миграционных параметров на формирование зон радиоактивного загрязнения подземных вод

Одним из требований экологически безопасного размещения объектов радиационной опасности является их максимально возможная удаленность от поверхностных водоемов и водотоков, что регулируется соответствующими нормами. Во многих случаях радиационно-опасные объекты располагаются на водораздельных участках, что дает возможность не рассматривать удаленные границы области фильтрации в течение интересующего периода времени. Тогда основные задачи прогноза и контроля миграции РВ в подземных водах сводятся к: а) определению зоны радиоактивного загрязнения на различные сроки; б) организации оптимального режима работы сети контрольных скважин, расположенных в зоне влияния объекта; в) определению периодов консервации колодцев и водозаборов вследствие возможного превышения допустимых концентраций радионуклидов в отбираемой воде.

Для водоносных горизонтов на водораздельных участках характерно преобладание пород с большим содержанием глинистых фракций. Коэффициент фильтрации этих пород (супесей, суглинков, глинистых песков) изменяется от сотых долей до единиц м/сут. Поэтому вследствие малой скорости фильтрации и высокой сорбционной емкости пород массопоток от объекта не достигает границ области. Прогнозирование миграции РВ в таких случаях допустимо проводить на основе расчетной схемы неограниченного пласта. При незначительных изменениях фильтрационного потока и мощности водоносного горизонта вблизи объекта допустимо осреднение соответствующих параметров на участке загрязнения. Предполагается, что массоперенос идет только в горизонтальном направлении, а отток вещества через подошву пласта пренебрежимо мал. Поэтому прогнозные значения определяются с не-

которым «инженерным» запасом, который количественно может быть оценен с помощью моделирования пространственной миграции (раздел 3.4).

Описанной расчетной схеме соответствует краевая задача совместного переноса компонент цепочки распада в неограниченной плановой области при наличии внутренних источников в виде прямоугольников и многоугольников. С помощью решений этой задачи (2.39) – (2.42) и (2.44) – (2.51) можно более точно, в отличие от известных результатов, отобразить реальную форму источников и состав выделяемых ими веществ, включая дочерние радионуклиды. Эти факторы существенно влияют на формирование зон радиоактивного загрязнения в подземных водах, что демонстрируют следующие примеры.

Пример 1. Требуется дать прогноз радиоактивного загрязнения подземных вод вблизи захоронения неправильной геометрической формы, а также определить оптимальные периоды работы наблюдательных скважин.

Захоронение представляет собой котлован, заполненный твердыми РАО, содержащими ^{90}Sr с общей активностью 10^{11} Бк, который засыпан сверху слоем земли. На участке захоронения имеет место непосредственный контакт радиоактивных материалов с близко залегающими подземными водами, а интенсивность выщелачивания определяется по (2.23), причем период полувыведения $T_{pv} = 5$ лет. Форма данного объекта в плане аппроксимирована многоугольником (рис. 3.1, 3.2).

Фильтрационный поток на участке захоронения имеет среднюю глубину $m_0 = 8$ м и характеризуется осредненным значением скорости движения подземных вод $0,02$ м/сут. Рассматриваемым условиям соответствуют принятые значения параметров дисперсии $D_x = 0,02$ м²/сут, $D_y = 0,2$ м²/сут; сорбции $n_{e,1} = 5,0$. При выполнении прогноза в данном случае допустимо пренебречь фоновой концентрацией ^{90}Sr , приняв ее равной нулю. Время прогноза отсчитывается с момента начала поступления радионуклида в подземные воды. Расчеты проведены по формуле (2.45), а их результаты представлены на рис. 3.1 – 3.6.

Положение зоны радиоактивного загрязнения с превышением ДК_Б по ^{90}Sr (15 КБк/м³) [39] показано на рис. 3.1 в моменты времени 1000 сут (1), 3000 сут (2), 5000 сут (3), 7000 сут (4). С течением времени эта зона, повторяющая форму источника, растягивается в направлении фильтрационного потока, а ее очертания сглаживаются. Вследствие малости поперечной дисперсии зона распространения ^{90}Sr расширяется не более, чем на 10 м по сравнению с поперечным размером источника.

В направлении фильтрационного потока стронций в концентрациях выше $ДК_B$ за 7000 сут продвинется от захоронения на расстояние около 140 м, причем его распространение с течением времени замедляется вследствие снижения запасов ^{90}Sr в источнике, влияния факторов дисперсии, сорбции и распада.

В зоне рассеяния вещества в фильтрационном потоке, рассчитанной на фиксированный момент времени (рис. 3.2) можно выделить подзону высоких концентраций радионуклида, определенную в данном примере по превышению 75% от максимального значения и приуроченную к захоронению (1); переходную подзону с высокими значениями градиента концентрации, удельная активность в пределах которой изменяется от 75% максимума концентрации до значения $ДК_B$ (2); подзону малых значений концентрации, в которой удельная активность уменьшается от $ДК_B$ до нижнего предела чувствительности измерения активности ^{90}Sr (0.7 КБк/м^3 , [OOS]) (3); условно «чистую» зону, в которой прогнозируемое повышение удельной активности не выше этой величины (4).

На рис. 3.3 отражена динамика изменения концентрации радионуклида вдоль характерного профиля по направлению потока ($x=80 \text{ м}$) на моменты времени 1000 сут (1), 3000 сут (2), 5000 сут (3), 7000 сут (4). Максимальные значения удельной активности (более 600 КБк/м^3 или 40 ДК_B) прогнозируются в непосредственной близости от захоронения в период до 3000 сут. В дальнейшем удельная активность снижается вблизи загрязнения, а на периферии зоны загрязнения – несколько увеличивается в результате конвекции.

На рис. 3.4 – 3.6 представлены графики прогнозируемого изменения концентрации ^{90}Sr (КБк/м^3) в шести контрольных точках, расположенных в зоне влияния захоронения (рис. 3.1). Для количественной оценки гидродисперсии на динамику рассеяния веществ рассмотрены два варианта значений ее компонент: $D_x = 0,02 \text{ м}^2/\text{сут}$, $D_y = 0,2 \text{ м}^2/\text{сут}$ (сплошные кривые); $D_x = 0,05 \text{ м}^2/\text{сут}$, $D_y = 0,5 \text{ м}^2/\text{сут}$ (штриховые кривые). Анализ графиков показывает, что практически во всех контрольных точках можно выделить такие этапы: а) концентрация нулевая, массопоток не достиг точки наблюдения; б) концентрация возрастает от нулевого до максимального значения, массопоток стабилизируется; в) значения концентрации медленно снижаются. Вместе с тем, этот процесс имеет свои особенности в зависимости от расположения пунктов наблюдения.

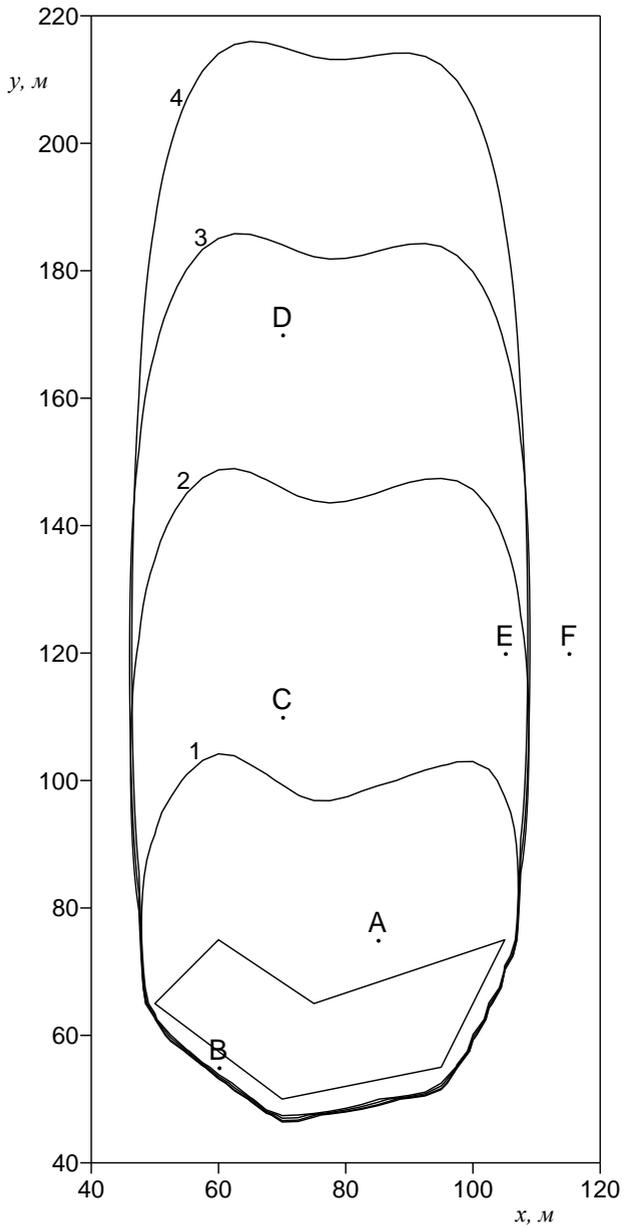


Рис. 3.1. Динамика формирования зоны радиоактивного загрязнения в потоке подземных вод.

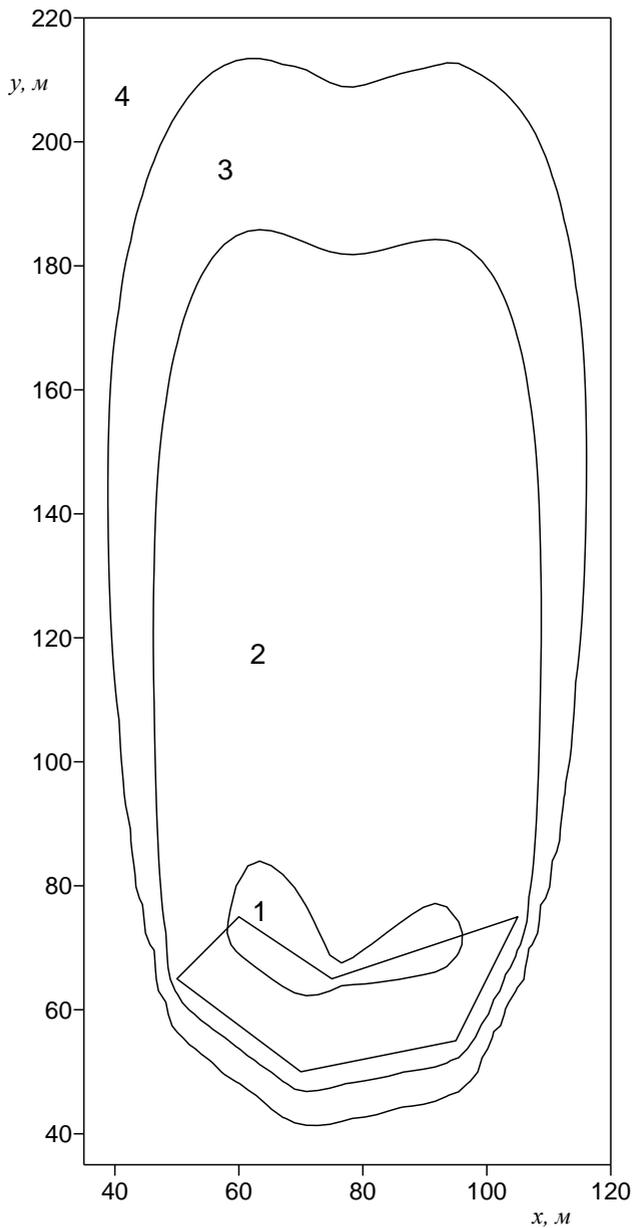


Рис. 3.2. Структура зоны радиоактивного загрязнения подземных вод при $t = 5000$ сут.

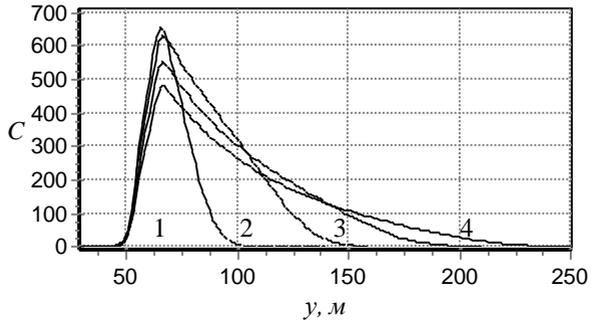


Рис. 3.3. Изменение концентрации радионуклида C вдоль профиля в направлении фильтрационного потока.

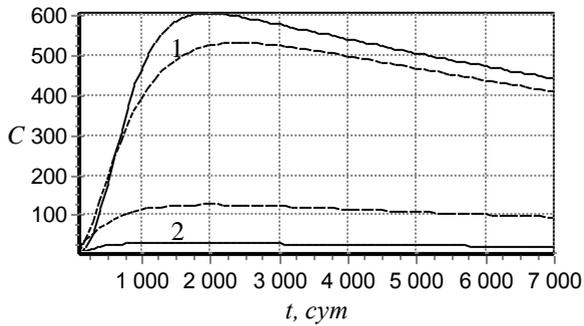


Рис. 3.4. Изменение концентрации радионуклида C во времени t в контрольных точках А (1) и В (2).

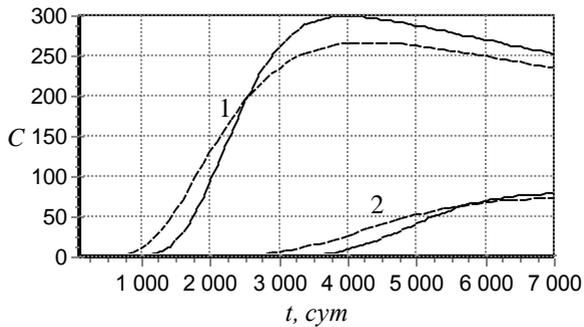


Рис. 3.5. Изменение концентрации радионуклида C во времени t в контрольных точках С (1) и D (2)

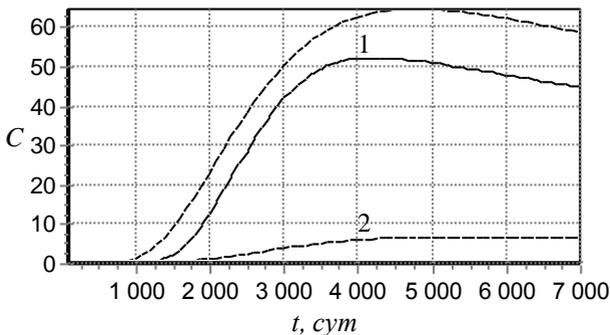


Рис. 3.6. Изменение концентрации радионуклида C во времени t в контрольных точках E (1) и F (2)

Для скважин, расположенных в непосредственной близости от захоронения (рис. 3.4), максимальная концентрация достигается за сравнительно короткий период времени (3 – 5 лет). В случае большей гидродисперсии максимальное значение удельной активности подземной воды в точке А, расположенной по направлению потока, достигается на более низком уровне, а в точке В, находящейся в противоположном направлении – на более высоком. Опробования в этих пунктах рекомендуется проводить, главным образом в период до 1000 – 1400 сут в точке В, и до 1600 – 2000 сут в точке А с интервалами продолжительностью до 200 сут. После установления максимального уровня активности опробования могут проводиться значительно реже, с интервалами в несколько лет.

Увеличение концентрации в скважинах, расположенных на большем удалении в направлении фильтрационного потока (рис. 3.5), начинается с некоторой задержкой и более длительным, по сравнению с точками А и В, периодом повышения концентрации от фонового до максимального значения. Для точки С данный период начинается с 1000 сут и заканчивается около 4000 сут, для точки D – с 3000 до 7000 сут. При увеличении параметров дисперсии продолжительность этого периода увеличивается, а время достижения загрязненных вод до пункта наблюдения уменьшается. Ввиду приближенности определения параметров дисперсии в полевых условиях можно рекомендовать начинать опробования в пунктах С и D не позднее прогнозируемого момента времени достижения их радионуклидом, определенного при наибольших значениях гидродисперсии. Рекомендуемая частота отбора

проб составляет для пункта С – начиная с 1000 сут с интервалами около 300 сут в период до 4000 сут, а затем с большими интервалами; для пункта D – начиная с 2200 сут с интервалами 400–500 сут.

При размещении пунктов контроля на периферии зоны загрязнения (рис. 3.6) следует учитывать высокую чувствительность результатов наблюдений относительно смещения этих пунктов перпендикулярно направлению скорости фильтрации. Даже при небольшом расстоянии (10 м) между точками E и F при отсутствии локальных неоднородностей прогнозируемые значения концентрации могут отличаться между собой более чем на порядок. Рассчитанная концентрация в точке E, расположенной ближе к очагу загрязнения, менее чувствительна к изменению параметров дисперсии. Этот фактор необходимо учитывать при мониторинге загрязнения подземных вод, сопоставляя результаты наблюдения с расчетами в различных контрольных точках.

Пример 2. Необходимо дать прогноз радиоактивного загрязнения подземных вод вблизи захоронения прямоугольной формы с учетом миграции дочерних компонент.

Моделирование совместного переноса компонент цепочки распада показано далее на примере материнского радионуклида ^{241}Pu и продукта его распада ^{241}Am . Источник поступления ^{241}Pu в водоносный горизонт имеет прямоугольную форму, а интенсивность перехода вещества из твердой фазы в раствор определяется зависимостью (2.23).

Дочерний ^{241}Am попадает в подземные воды двумя путями: 1) при распаде плутония, мигрирующего в подземных водах, 2) при распаде плутония, содержащегося в источнике. В первом случае прогноз миграции америция должен выполняться как для дочернего вещества, во втором – как для материнского вещества с интенсивностью, которая учитывает распад ^{241}Pu в источнике и скорость образования ^{241}Am , а также скорость выщелачивания америция из твердой фазы.

При проведении расчетов приняты следующие значения параметров: периоды полувыведения $T_{pv,1} = 10$ лет, $T_{pv,2} = 5$ лет; компоненты скорости фильтрации $v_x = 0,02$ м/сут, $v_y = 0,06$ м/сут; параметры гидродисперсии $D_{x,1} = D_{x,2} = 0,1$ м²/сут, $D_{y,1} = D_{y,2} = 0,3$ м²/сут; коэффициенты эффективной пористости $n_{e,1} = 10$, $n_{e,2} = 7$; мощность водоносного горизонта $m_0 = 8$ м. Начальные концентрации обоих радионуклидов приняты равными нулю.

Сравнение распределений концентрации двух компонент в фильтрационном потоке (рис. 3.7) позволяет отметить основную особенность массопереноса дочернего вещества – зона его максимальных

концентраций расположена вне источника ниже по потоку и смещена относительно аналогичной зоны материнского вещества. Это обусловлено тем, что источником поступления америция является зона рассеяния материнского вещества. Если максимум его концентрации в рамках двумерной модели всегда расположен на территории источника, то положение максимума концентрации дочернего вещества с течением времени выходит за эти пределы.

На рис. 3.8, 3.9 представлены графики изменения концентрации радионуклидов в точках А и В, отмеченных на рис. 3.7, при следующих значениях миграционных параметров:

- 1) $v_x = 0,02$ м/сут, $v_y = 0,06$ м/сут, $D_x = 0,1$ м²/сут, $D_y = 0,3$ м²/сут,
- 2) $v_x = 0,01$ м/сут, $v_y = 0,03$ м/сут, $D_x = 0,05$ м²/сут, $D_y = 0,15$ м²/сут.

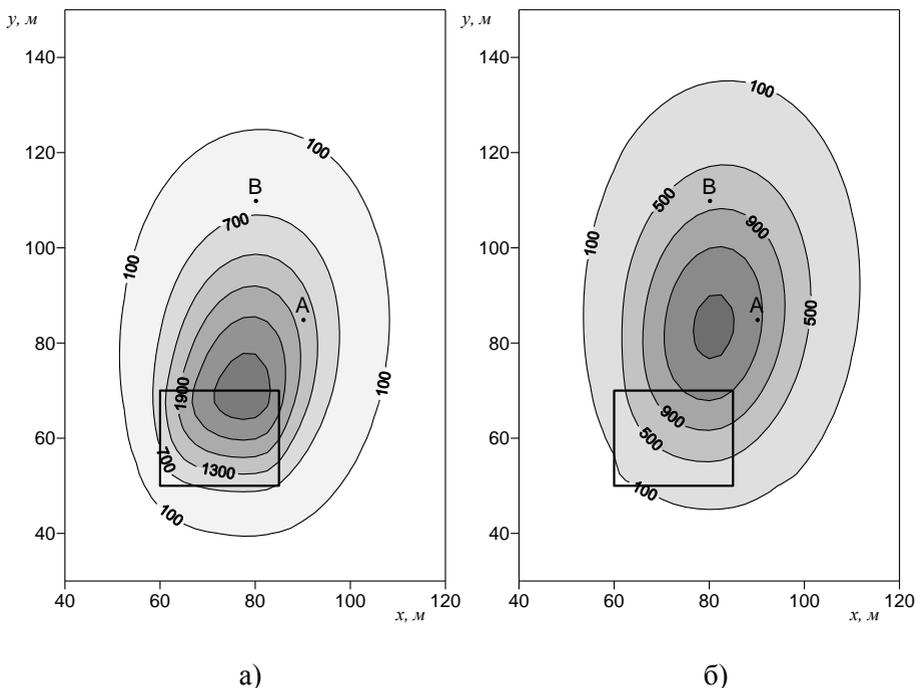
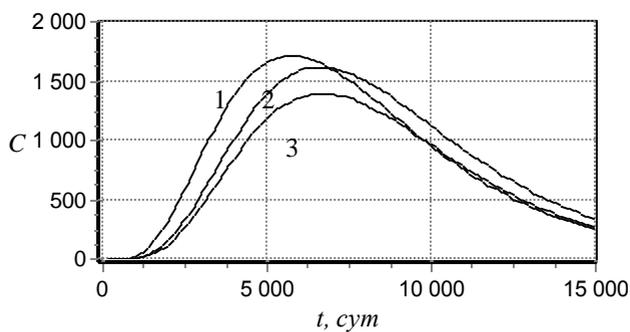


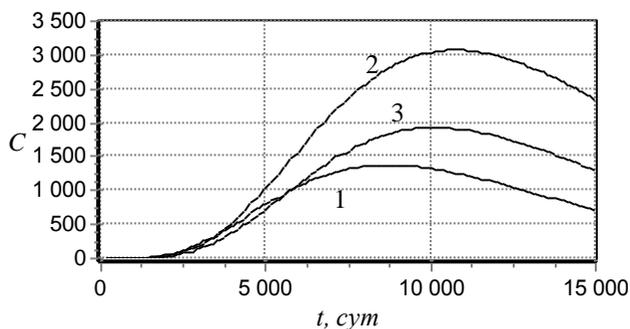
Рис. 3.7. Прогнозируемое распределение в плане концентрации (КБк/м³) материнского ²⁴¹Pu (а) и дочернего ²⁴¹Am (б) в подземных водах через 3000 сут с начала поступления веществ в водоносный горизонт.

На рис. 3.8, 3.9 индексом «1» обозначена концентрация ^{241}Pu , «2» – ^{241}Am , образующегося в водоносном горизонте; «3» – ^{241}Am , образующегося в источнике.

Сопоставление графиков позволяет обнаружить отклонения между моментами достижения максимума концентраций материнского и дочернего веществ. Это объясняется отличием действительных скоростей переноса ($v_{x,1}^* \neq v_{x,2}^*$, $v_{y,1}^* \neq v_{y,2}^*$) при различных значениях параметров сорбции $n_{e,1}$, $n_{e,2}$. Кроме того, концентрация дочернего вещества зависит от соотношений периодов полураспада $T_{1/2,1}$ и $T_{1/2,2}$, а также полувыведения из твердой фазы $T_{pv,1}$ и $T_{pv,2}$. Снижение концентрации после достижения максимума связано с уменьшением начальных запасов материнского вещества в источнике с течением времени.

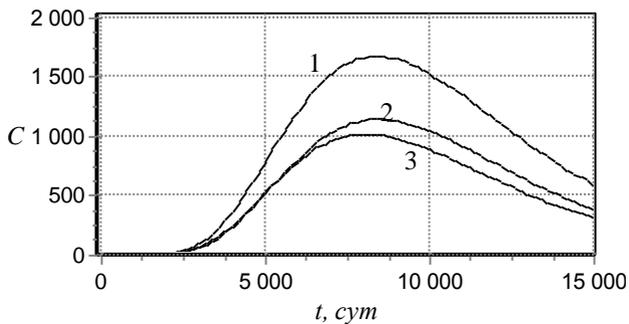


а)

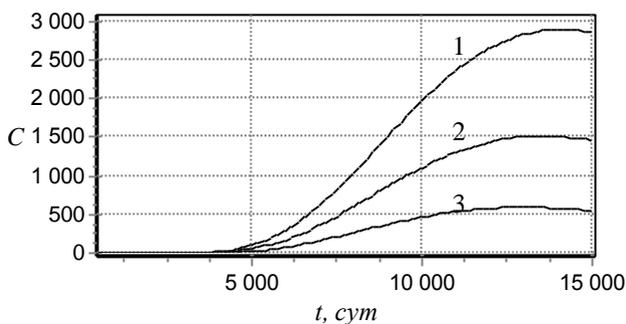


б)

Рис. 3.8. Изменение во времени t концентрации радионуклидов C (КБк/м³) в точке А (рис. 3.7) при значениях миграционных параметров «1» (а) и «2» (б).



а)



б)

Рис. 3.9. Изменение во времени t концентрации радионуклидов C (КБк/м³) в точке В (рис. 3.7) при значениях миграционных параметров «1» (а) и «2» (б).

В пунктах наблюдения, расположенных ближе к захоронению (в точке А) следует ожидать опережающего появления Рu с большей, чем у Am, концентрацией, тогда как в более удаленных пунктах (в точке В) имеет место обратное. При прогнозах распространения дочернего радионуклида в подземных водах следует дифференцированно учитывать указанные выше два пути его поступления в водоносный пласт, поскольку вклад каждого из них сопоставим. В условиях замедленного гидродинамического режима (вариант «б») и более быстрого распада Рu по сравнению с Am ($T_{1/2,1} = 14,4$ года и $T_{1/2,2} = 433$ года) максимум концентрации материнского радионуклида достигается на более низком уровне, а дочернего – на более высоком.

Для оптимальной организации контроля радиоактивного загрязнения в пунктах А и В отбор проб по суммарной активности и по отдельным изотопам следует проводить, начиная с 500 сут для точки А и спустя 1000 сут для точки В с ориентировочной частотой один раз в 1,5 – 2 года.

3.3. Динамика поступления радионуклидов в поверхностные водоемы

Проекты размещения объектов радиационной опасности должны обосновываться прогнозами возможного загрязнения поверхностных водоемов и водотоков в результате выноса в них РВ с подземным стоком. В частности, прогнозированию подлежат следующие показатели: 1) время начала поступления веществ в поверхностные воды; 2) ширина зоны загрязнения на границе разгрузки водоносного горизонта; 3) интенсивность поступления веществ в поверхностные водоемы и водотоки; 4) суммарная активность, вынесенная за период прогноза из подземных вод; 5) положение границы условно безопасного расстояния от источника загрязнения до водного объекта.

Участки фильтрационного потока вблизи поверхностных водоемов и водотоков приурочены, как правило, к речным долинам, которые сложены породами с преобладанием песчаных фракций. Коэффициенты фильтрации таких грунтов изменяются от нескольких единиц до десятков м/сут. Поэтому вследствие более высоких, по сравнению с участками водораздела, скоростей фильтрации и меньших значений параметров сорбции песчаных аллювиальных отложений радионуклиды могут сравнительно быстро распространяться к границе области.

Прогноз поступления веществ в поверхностные водоемы (водотоки) можно выполнить с помощью моделей горизонтального массопереноса в плановом фильтрационном потоке, направленном в сторону границы от внутренних источников. В отношении параметров этих источников, характера фильтрационного течения и свойств водовмещающих пород остаются в силе сделанные в разделе 3.2 допущения.

Описанной схеме соответствует краевая задача переноса радионуклида в двумерной полуограниченной области при наличии прямоугольного источника с переменной во времени интенсивностью. С помощью аналитических решений этой задачи, полученных в разделе 2.3,

можно учитывать положение, размеры и активность источника, типы границ области как факторы, определяющие интенсивность массопотока в поверхностные водоемы (водотоки).

Пример 3. Требуется дать прогноз радиоактивного загрязнения подземных вод и поверхностного водоема вблизи хранилища радиоактивных отходов и определить параметры возможных защитных мероприятий.

Хранилище отходов размером 20×30 м в плане расположено в 500 м от берега водоема (рис. 3.10). Вследствие нарушения гидроизоляции и герметичности дна хранилища происходит непосредственное поступление растворенного ^{90}Sr из отходов в подземные воды с оцениваемой максимальной активностью $q_0 = 100 \text{ КБк}/(\text{м}^2 \cdot \text{сут})$. Интенсивность поступления убывает во времени пропорционально распаду Sr, содержащегося в хранилище, и описывается зависимостью (2.22).

Движение подземных вод на данном участке определяется разностью напоров H на двух параллельных границах: на берегу реки ($H = 68$ м) и на верхнем контуре питания на удалении 1500 м от него ($H = 75$ м). Водоносный пласт, сложенный аллювиальными песками со средним коэффициентом фильтрации 20 м/сут, залегает на практически горизонтальном водоупоре. Согласно формуле Дюпюи средняя скорость фильтрации на участке между хранилищем и берегом водоема составляет $v_x = 0,118$ м/сут ($v_y = 0$), а осредненная мощность водоносного горизонта – 9,4 м. Приняты следующие значения параметров дисперсии $D_x = 1,5 \text{ м}^2/\text{сут}$, $D_y = 0,2 \text{ м}^2/\text{сут}$ и эффективной пористости пород $n_e = 1,2$.

В рассматриваемых условиях применимы предпосылки гидравлической теории фильтрации, что позволяет использовать двумерные модели массопереноса. На границе разгрузки, представляющей собой контакт подземных и поверхностных вод, задается условие (2.79), причем удельная активность поверхностных вод принимается равной нулю. При выполнении расчета в данном случае фоновая концентрация ^{90}Sr также принимается равной нулю. Время отсчитывается с момента начала поступления радионуклида в подземные воды. Расчеты проводились по формулам (2.82), (2.97) и (2.115). Результаты прогноза миграции для различных вариантов эксплуатации хранилища представлены на рис. 3.10 – 3.12.

На рис. 3.10 сплошными кривыми показаны изолинии концентрации ^{90}Sr в подземных водах в единицах ДКБ, а жирной кривой – граница зоны, вне которой изменение удельной активности в подземной воде не

регистрируется приборами. Согласно прогнозу, зона с превышением ДК_Б менее чем за 15 лет достигнет водоема на участке шириной до 300 м. В данном случае радиоактивное загрязнение характеризуется высоким уровнем: вблизи хранилища удельная активность подземных вод превышает 50 ДК_Б, а на границе области – 1,0 ДК_Б.

На рис 3.11 отражена динамика изменения концентрации ⁹⁰Sr вдоль границы водоема. Распределение концентрации показано на моменты времени 4000 сут (1), 5000 сут (2), 7000 сут (3), 12000 сут (4). Длина участка, на котором превышена допустимая концентрация, составляет не более 200 м. Максимальных значений активности (около 1,0 ДК_Б) следует ожидать к моменту времени 7000 сут.

Технологически возможными защитными мероприятиями по предотвращению загрязнения поверхностных вод в данном случае являются: 1) ликвидация источника загрязнения с перезахоронением отходов в другое место; 2) перехват загрязненных подземных вод с помощью горизонтального дренажа и их последующий отвод.

Определение экологически и экономически оптимальных сроков перезахоронения может быть проведено на основе прогноза миграции стронция при измененной активности источника, отражающей его ликвидацию через определенное время

$$q_0(t) = \begin{cases} q_0 \exp(-\lambda t), & t < t_1, \\ 0, & t \geq t_1; \end{cases}$$

где t_1 – момент времени полного извлечения отходов из хранилища. Прогноз миграции выполнен при $t_1 = 5$ и 10 лет.

На рис. 3.10 штриховыми кривыми показаны изолинии концентрации ⁹⁰Sr в подземных водах в единицах ДК_Б спустя 5 лет после извлечения отходов при $t_1=10$ лет. Эффект снижения концентрации проявляется только вблизи хранилища и практически не сказывается к указанному сроку вблизи водоема. В результате перезахоронения можно ожидать снижения максимальных концентраций ⁹⁰Sr в подземных водах с 65 до 30 ДК_Б.

На рис. 3.12 представлен график изменения во времени интенсивности поступления ⁹⁰Sr в поверхностный водоем: без перезахоронения (1), при извлечении отходов спустя 10 лет (2) и 5 лет (3). Ликвидация захоронения позволит существенно уменьшить вынос радионуклида с подземным стоком в водоем. Рассчитанное суммарное поступление стронция в водоем за 50 лет составит: $7,79 \cdot 10^8$ КБк для варианта «1», $2,19 \cdot 10^8$ КБк для варианта «2», $1,09 \cdot 10^8$ КБк для варианта «3».

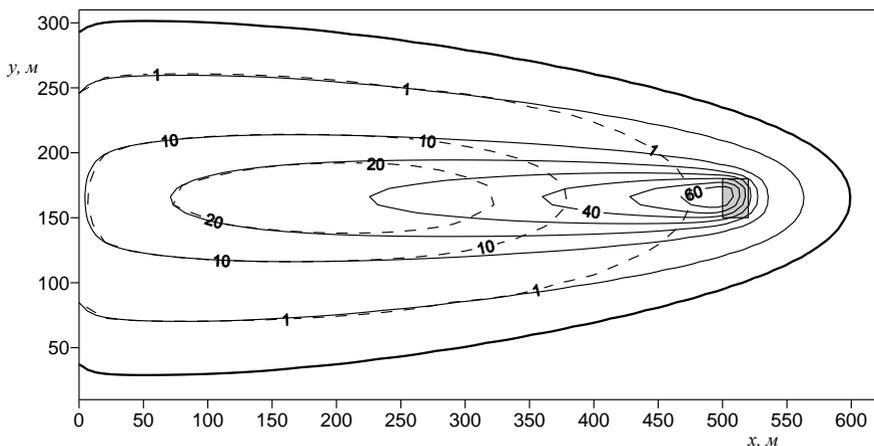


Рис. 3.10. Распределение концентрации ^{90}Sr в подземных водах при различных вариантах эксплуатации хранилища отходов.

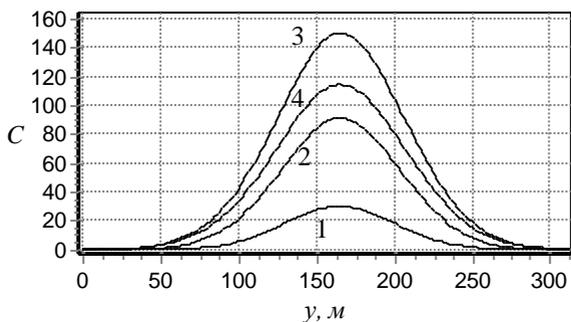


Рис. 3.11. Распределение концентрации радионуклида C (КБк/м³) вдоль границы области фильтрации в различные моменты времени.

Расчет параметров траншеи по перехвату загрязненных вод выполнен с учетом изменения фильтрационного потока, вызванного действием дренажа. В силу местных условий дренаж удобно оборудовать на расстоянии 200 м от хранилища. Без работы дренажа мощность водоносного горизонта в сечении дренажа, определенная по формуле Дюпюи, составляет 9,8 м. Расчет удельного расхода дренажа с учетом ее несовершенства при заглублении ее дна в водоносный пласт: на 1,5, 2,0 и 2,5 м проводился по методике, изложенной в [44].

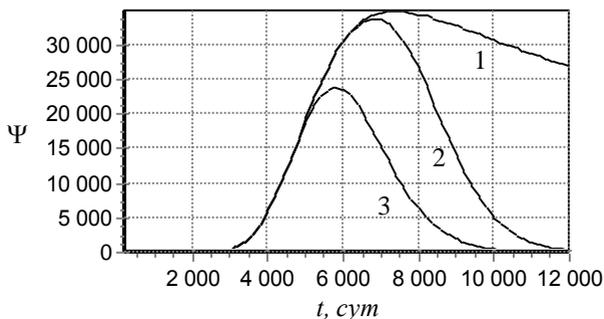


Рис. 3.12. Динамика массопотока Ψ (Бк/сут) в поверхностный водоем во времени t .

При заглублении дрены на 1,5 м ее удельный расход составит $1,1 \text{ м}^2/\text{сут}$, что не обеспечивает полный перехват загрязненной воды, проходящей от хранилища в сторону водоема. При заглублении дна на 2,5 м обеспечивается полный перехват загрязненных вод, удельный расход дрены составит $1,73 \text{ м}^2/\text{сут}$, причем 18% откачиваемой воды будет притекать со стороны водоема. Оптимальным из рассмотренных вариантов является заглубление дна траншеи в водоносный пласт на 2 м, когда при минимально необходимом объеме работ по оборудованию дрены обеспечивается полный перехват загрязненных вод. Удельный расход дрены составит $1,44 \text{ м}^2/\text{сут}$, причем всего 6% откачиваемой воды будет притекать со стороны водоема. Средняя мощность водоносного горизонта на участке между дренаем и хранилищем составит 8,6 м, а осредненная скорость фильтрации $v_x = 0,16 \text{ м/сут}$.

В условиях постоянной откачки притекающей воды дренажная траншея приближенно рассматривается как граница второго рода области массопереноса [13], на которой задается условие (2.80). Поскольку фильтрационный поток при выбранном заглублении направлен как со стороны хранилища, так и со стороны водоема, то незначительное количество ^{90}Sr , мигрирующего к границе пласта под дренаем за счет гидродисперсии, возвращается обратно с потоком воды к дренаю. Значения миграционных параметров (кроме v_x и D_x) остаются неизменными, а расчет выполняется в предположении, что миграция происходит с самого начала при работе дренажа в стационарном режиме. Результаты прогноза отражены на рис. 3.13, 3.14.

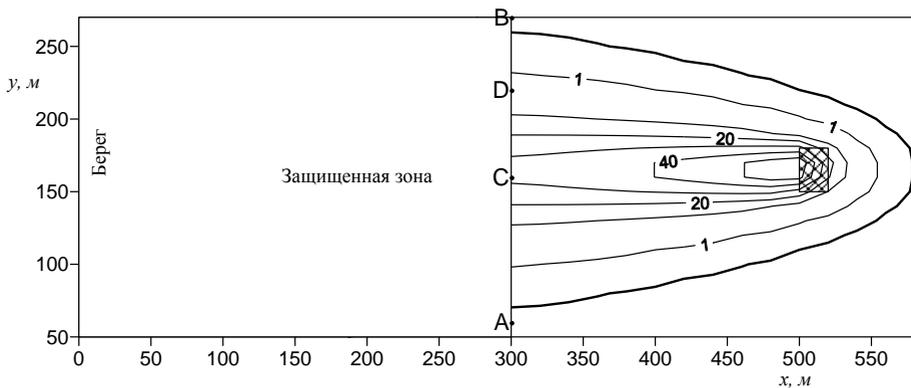


Рис. 3.13. Распределение концентрации ^{90}Sr в подземных водах в условиях перехвата загрязненных вод дренажом спустя 15 лет.

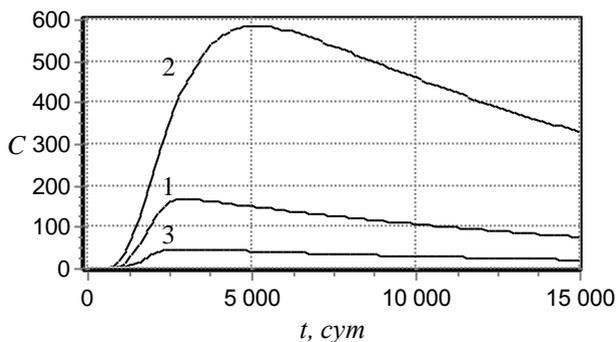


Рис. 3.14. Изменение во времени t концентрации C (КБк/м³) в дренажной воде

На рис. 3.13 показаны изолинии концентрации стронция в подземных водах в единицах ДК_Б, а жирной кривой – граница зоны, вне которой изменение удельной активности подземной воды не регистрируется приборами. Ширина зоны с превышением ДК_Б в сечении $x = 300$ м определяет длину траншеи, минимально необходимую для полного перехвата ^{90}Sr , распространяющегося в водоносном горизонте. Такой перехват будет достигнут при расположении концов дрены в точках А и В. Тогда длина дрены составит 210 м, а ее общий фильтрационный расход – 302,4 м³/сут.

На рис. 3.14 показана динамика изменения концентрации ^{90}Sr в дренажной воде. Кривая «1» соответствует осредненной концентрации, которая равна отношению массопотока в дренаж к ее фильтрационному расходу. Кривые «2» и «3» отражающие изменения в точках С и D, указывают на существенные различия концентрации в воде, поступающей в дренаж на ее разных участках. В течение первых 1000 сут вода из дренажа является условно безопасной, после чего в период до 2500 сут ее удельная активность возрастает до 160 КБк/м^3 , а затем медленно снижается. Таким образом, отбираемую воду следует рассматривать как жидкие РАО низкой активности и перерабатывать в соответствии с имеющимися нормами.

Сравнение рассмотренных способов защиты позволяет отметить следующее. Перезахоронение отходов не предотвратит полностью поступление радионуклида в водоем, но может существенно уменьшить его интенсивность. Перехват радиоактивных вод с помощью дренажа позволяет избежать не только загрязнения водоема, но и подземных вод в прибрежной зоне. Вместе с тем, перезахоронение осуществляется обычно в течение сравнительно небольшого периода, а работа дренажа предполагает откачку радиоактивных вод и их переработку длительное время. Моделированием оценены защитные свойства водоносного горизонта как естественного барьера. Так, суммарная активность воды, откачанной с помощью дренажа в течение 50 лет, на 28% выше активности ^{90}Sr , которая может попасть в водоем за тот же период без проведения защитных мероприятий, что связано с распадом радионуклида в прибрежной зоне.

Пример 4. Требуется оценить условно безопасное расстояние от потенциального источника радиоактивного загрязнения (пункта захоронения РАО) до расположенного вблизи поверхностного водоема. Этот параметр определяется как минимально возможное расстояние между объектом и границей области фильтрации, при котором поступление РВ с подземным стоком в водоем вследствие факторов самоочищения (сорбции и распада) практически исключается.

Опасность загрязнения подземным вод на объекте обусловлена возможностью эпизодических утечек жидких РАО с образованием в водоносном горизонте радиоактивного «пятна». Такая ситуация может моделироваться заданием мгновенного источника с начальной концентрацией радионуклида C_0 , намного превышающей его фоновое содержание в подземных водах. В начальный момент времени общее количество радионуклида, содержащегося в источнике в жидкой и твердой фазах

при условии мгновенного достижения между ними равновесного состояния, определяется по формуле

$$A_0 = (x_2 - x_1)(y_2 - y_1)m_0(n + K_d(1 - n))C_0.$$

Областью массопереноса рассматриваемого в данном примере ^{90}Sr является водоносный горизонт средней мощности $m_0 = 10$ м, сложенный мелкозернистыми песками. На границе области фильтрации имеет место непосредственный контакт подземных и поверхностных вод. Осредненное значение скорости фильтрации $v_x = 0,08$ м/сут, $v_y = 0$, параметров гидродисперсии $D_x = 0,75$ м²/сут, $D_y = 0,15$ м²/сут. Размеры участка первоначального загрязнения водоносного пласта с учетом условий хранения РАО на объекте приняты равными 20 м вдоль оси Ox и 30 м вдоль оси Oy .

Для решения поставленной задачи определялись следующие величины: общее количество радиоактивного вещества $\Psi_{\Gamma,t}$, вынесенного из области с подземным стоком за все время, доля \bar{P} от исходного количества радионуклида в источнике первоначального загрязнения, который был вынесен через границу за все время: $\bar{P} = \Psi_{\Gamma,t}/P_0$. На рис. 3.15 представлена зависимость \bar{P} (в %) от расстояния источника до границы водоема при следующих значениях параметров сорбции: $n_e = 2,5$ (1), $n_e = 5,0$ (2), $n_e = 10,0$ (3).

Анализ графика показывает, что с увеличением сорбции и замедлением скорости миграции минимальное безопасное расстояние достигается при меньшей удаленности источника от границы.

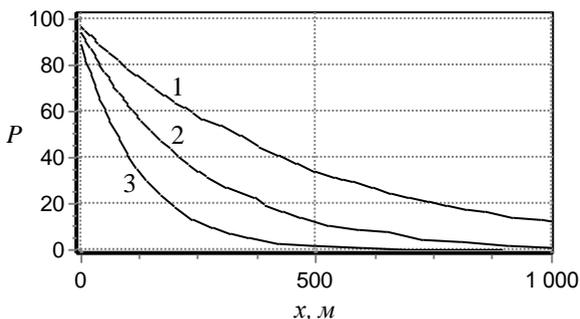


Рис. 3.15. Изменение общего поступления радионуклида P (%) в водоем с увеличением расстояния x от источника загрязнения до границы.

Так, при $n_e = 10$ необходимая степень гидрогеоэкологической безопасности гарантирована для объекта, удаленного от водоема более чем на 700 м. В то же время при меньших n_e даже при удалении объекта от водоема более чем на 1000 – 1200 м, нельзя исключать возможность попадания РВ в поверхностные воды.

Таким образом, в рассмотренном примере дана количественная оценка защитных свойств водоносного пласта как естественного барьера на пути распространения радиоактивных веществ.

Пример 5. Необходимо определить массопоток радионуклида через границу области фильтрации в условиях высокого испарения и накопление вещества в приграничной зоне.

Хранилище отходов имеет размеры 20×50 м и расположено на расстоянии 280 м от границы разгрузки водоносного горизонта в реку. Динамика поступления ^{90}Sr в водоносный горизонт описывается зависимостью (2.22), причем максимальная интенсивность $q_0 = 100$ Бк/(м²·сут). Участок между хранилищем и рекой характеризуется следующими значениями миграционных параметров: $D_x = 1,0$ м²/сут, $D_y = 0,2$ м²/сут, $v_x = 0,1$ м/сут, $v_y = 0,02$ м/сут, $n_e = 1,2$. Результаты моделирования представлены на рис. 3.16 – 3.18.

В отличие от случая отсутствия испарения ($\alpha = 0$) [52], когда существует только один максимум концентрации на участке, занимаемом источником, при $\alpha > 0$ появляется другой максимум в приграничной зоне (рис. 3.16). Увеличение испаряемости приводит к существенному накоплению вещества вблизи границы (рис. 3.17), что отражается возрастанием значений C в несколько раз, особенно при $\alpha \rightarrow 1,0$. Наибольшего накопления следует ожидать в приграничной полосе шириной до 20 м, с увеличением конвекции размеры этой зоны уменьшаются.

С ростом испарения поток ^{90}Sr через границу снижается за счет увеличения времени миграции радионуклида в водоносном горизонте, при этом в большей степени сказывается фактор распада (рис. 3.18). При значениях параметра $\alpha < 0,8$ не отмечается заметного снижения массопотока $\Psi(t)$, поскольку уменьшение фильтрационного расхода через границу практически полностью компенсируется повышением концентрации ^{90}Sr в воде. Существенное уменьшение $\Psi(t)$ происходит при $\alpha > 0,9$. В предельном случае $\alpha = 1$ массопоток из водоносного горизонта становится равным нулю. Наиболее интенсивно накопление ^{90}Sr в приграничной зоне происходит при значениях испаряемости, превышающих скорость фильтрации в граничном сечении. С увеличением α воз-

растает период стабилизации массопотока через границу и снижается его максимальное значение.

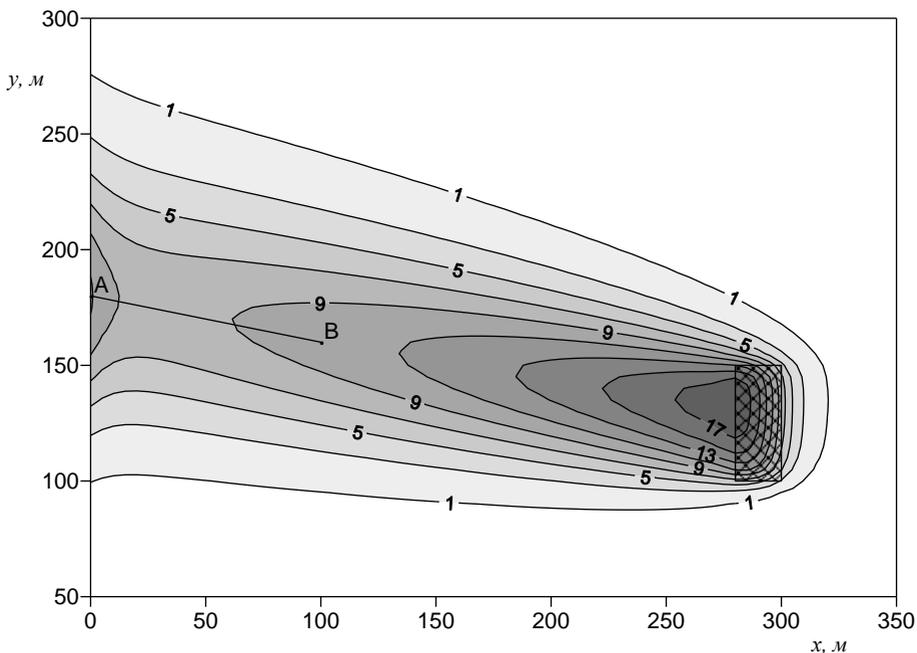


Рис. 3.16. Распределение концентрации ^{90}Sr (Бк/м³) в подземных водах в момент времени 20 лет (параметр испаряемости $\alpha=0,3$).

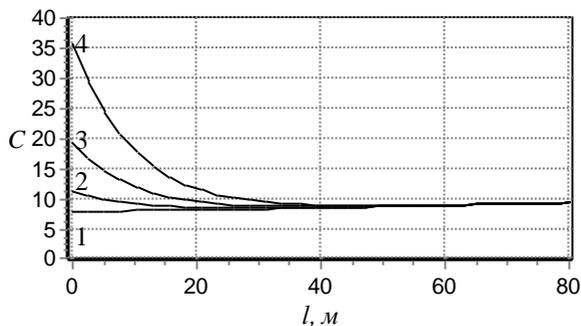


Рис. 3.17. Распределение концентрации вдоль профиля АВ (рис. 3.17) при различных значениях параметра α : 1) 0; 2) 0,3; 3) 0,6; 4) 0,8.

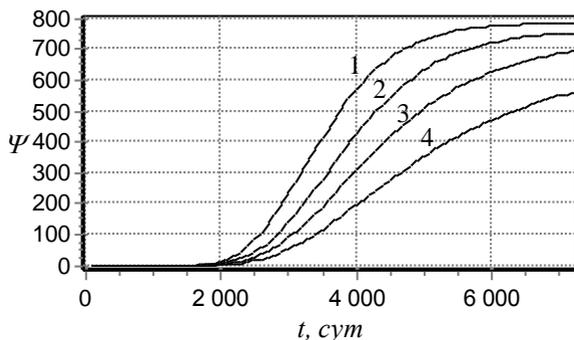


Рис. 3.18. Динамика массопотока Ψ (Бк/сут) через границу области фильтрации при различных значениях параметра α : 1) 0; 2) 0,8; 3) 0,9; 4) 0,95.

Разработанная модель позволяет количественно оценивать накопление веществ на склоновых участках, где происходит высачивание подземных вод.

3.4. Учет пространственного характера миграции при выполнении прогнозов загрязнения подземных вод

В ряде случаев на масштаб и динамику загрязнения подземных вод оказывает существенное влияние пространственный характер миграции. Представленные ниже примеры показывают, как с помощью пространственных моделей можно отобразить такие особенности массопереноса, как поглощение веществ в разделяющих водоупорных слоях, задержку массопотока в водоносный горизонт вследствие сорбции в зоне аэрации, различное высотное положения источника вещества в фильтрационном потоке.

При миграции на большие расстояния в неглубоких водоносных пластах начинает проявляться поглощающий эффект водоупора. Как правило, в рамках двумерных моделей отток вещества за пределы водоносного горизонта через ограничивающие его сверху и снизу слабопроницаемые слои не учитывается, что приводит к завышению определяемой концентрации.

Учет указанного фактора в рамках квазитрехмерной модели нескольких взаимосвязанных водоносных горизонтов [8] требует решения системы уравнений, описывающих массоперенос в каждом слое. Применение такой модели целесообразно при существенном перетекании через разделяющие слои, но вряд ли обоснованно для водоносного горизонта, залегающего на плотном, практически непроницаемом водоупоре. В таком случае следует оценить поправки в расчеты двумерного массопереноса, связанные с поглощением вещества в водоупоре.

Пример 6. Необходимо оценить снижение концентрации радионуклида в водоносном горизонте, который подстилается слабопроницаемым водоупором, где происходит практически необратимая сорбция.

Прямоугольный в плане источник поступления вещества интенсивностью $q_0=1$ Бк/(м³·сут) частично заглублен в водоносный горизонт, так что в расчетной схеме пространственного источника его верхняя координата z_1 принята равной нулю; для горизонтальных координат заданы следующие значения, м: $x_1 = -10$, $x_2 = 0$, $y_1 = -10$, $y_2 = 10$.

Требуемые оценки можно получить на основе схемы неограниченного в плане водоносного горизонта конечной мощности. Для расчетов использовались следующие значения миграционных параметров: $D_x = 0,2$ м²/сут, $D_y = 0,05$ м²/сут, $D_z = 0,05$ м²/сут; $v_y = 0$, $n_e = 2$, мощность пласта $m_0 = 10$ м.

Результаты моделирования, представленные на рис. 3.19 – 3.22, получены при различных значениях параметров относительных величин: времени $\tau = D_z^* t / m_0^2$, скорости горизонтального переноса $Pe_x = v_x(x_2 - x_1) / D_x$, заглубления источника в водоносный горизонт $\xi = z_2 / m_0$, сорбции в водоупоре $\gamma = \beta l m_0 / D_z$, распада $\bar{\lambda} = \lambda t$.

Неравномерность распределения концентрации вещества по глубине пласта сглаживается в результате дисперсии в вертикальном направлении по мере удаления от источника (рис. 3.19). В случае незначительной сорбции в водоупоре уже на расстоянии $5m_0$ от источника, заглубленного на $0,2m_0$ в водоносный горизонт, отношение максимальной концентрации к ее минимальному значению по глубине не превышает 3,0, тогда как вблизи источника ($x = 2m_0$) оно достигает 5,2. Более интенсивное поглощение радионуклида в водоупоре усиливает неравномерность вертикального распределения вещества. Отношение максимальной концентрации к минимальной на расстояниях $2m_0$ и $5m_0$ увеличивается соответственно до 11,5 и 6,2.

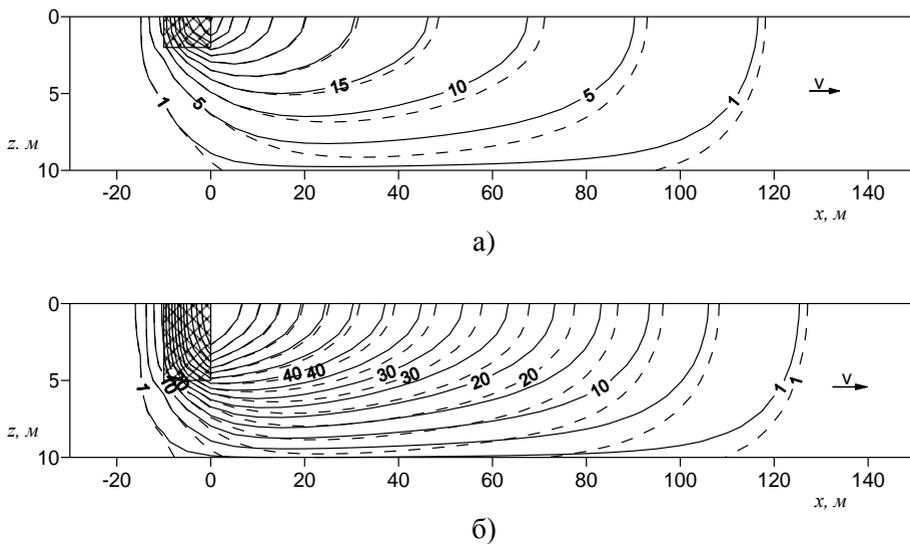


Рис. 3.19. Распределение концентрации C (КБк/м³) в вертикальном сечении $y=0$ в момент времени $\tau=0,5$ (2000 сут) при различной интенсивности поглощения γ в водоупоре и различном заглублении источника в водоносный горизонт ξ : а) $\xi=0,2$, б) $\xi=0,5$; $\gamma=7,0$ (сплошные кривые), $\gamma=0,6$ (штриховые кривые).

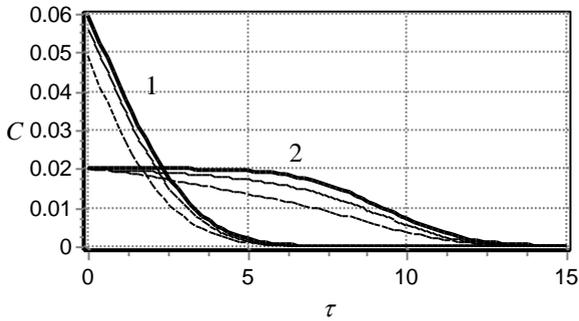
Согласно результатам моделирования, использование осредненной по вертикали концентрации в данном примере допустимо для участков, удаленных от места поступления вещества на 8 – 10 длин источника. Заглубление источника в водоносный горизонт способствует ускоренному выравниванию концентрации вдоль оси Oz , однако это влияние становится заметным только при вертикальных размерах источника, соразмерных с мощностью пласта m_0 .

На рис. 3.20 – 3.21 представлены графики распределения осредненной по вертикали относительной концентрации

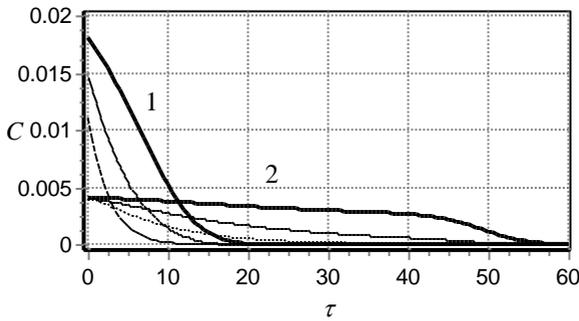
$$C_s(x, y, t) = \frac{1}{C_{\max} m_0} \int_0^{m_0} C(x, y, z, t) dz \quad (3.8)$$

вдоль направления потока в сечении $y=0$. Значения C_s , полученные по формуле (3.8) при различных параметрах Pe_x , γ и ξ , сопоставлены со

значениями осредненной концентрации $C_2(x, y, t)$, рассчитанными согласно двумерной модели по формулам (2.39) – (2.40) без учета поглощения на водоупоре. Значения концентрации, рассчитываемой в рамках двумерной модели (C_2), показаны жирной линией, значения осредненной концентрации (C_s) при различных параметрах – сплошными и штриховыми линиями обычной толщины.

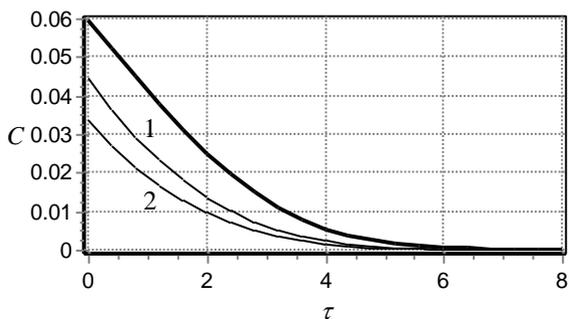


а)

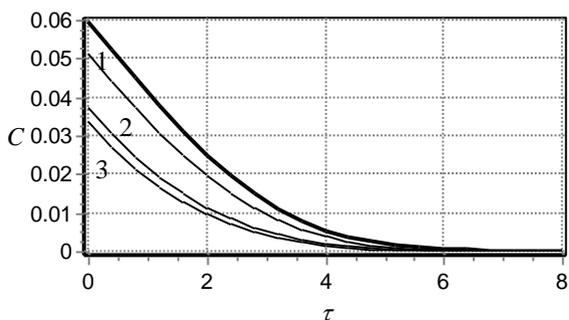


б)

Рис. 3.20. Распределение относительной концентрации вдоль фильтрационного потока в различные моменты времени $\tau = 0,5$ (а) и $\tau = 2,0$ (б): при различной скорости переноса $Pe_x = 1$ (1) и $Pe_x = 10$ (2), и интенсивности сорбции на водоупоре $\gamma = 1$ (сплошные линии), $\gamma = 10$ (штриховые линии).



а)

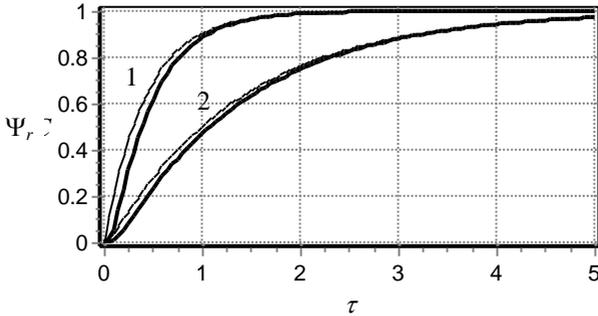


б)

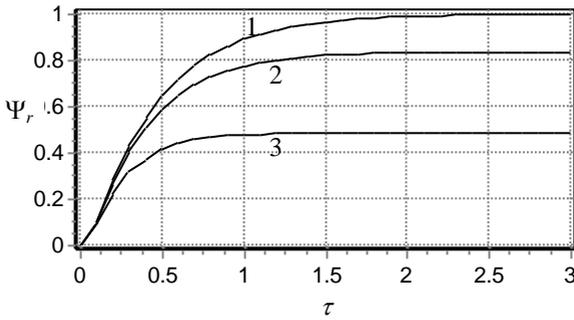
Рис. 3.21. Распределение относительной концентрации вдоль потока в момент времени $\tau = 0,5$ и параметре конвекции $Pe_x = 1$ при различном заглублении источника в водоносный горизонт ξ и параметре сорбции γ : а) $\xi = 0,5$ (1), $\xi = 1,0$ (2) при $\gamma = 10$; б) $\gamma = 1$ (1), $\gamma = 10$ (2), $\gamma = 50$ (3) при $\xi = 0,2$.

Усиление конвекции и рост числа Pe_x сопровождается снижением концентрации и расширением области распространения вещества. Даже сравнительно небольшое поглощение на водоупоре при $\gamma = 1,0$ ($\beta = 0,05 \text{ сут}^{-1}$, $l = 0,1 \text{ м}$) приводит к существенному снижению C_s относительно C_2 . Так, при изменении τ от 0,5 до 2 и $Pe_x = 1,0$ отношение C_s/C_2 уменьшается с 0,94 до 0,8 ($x = 0$), с 0,87 до 0,63 ($x = 2 m_0$), с 0,82 до 0,44 ($x = 5 m_0$). С увеличением заглубления источника (параметра ξ) и скорости сорбции в верхнем слое также происходит снижение C_s относительно C_2 на 15 – 50%.

На рис. 3.22 приведены зависимости изменения относительного массопотока $\Psi_r(t) = \Psi_\Sigma(t) / [q(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)(z_2 - z_1)]$ через подошву водоносного горизонта во времени при $Pe_x = 1$. При уменьшении заглубления источника ($\xi \rightarrow 0$) и поглощения в водоупоре ($\gamma \rightarrow 0$) отток вещества за пределы области уменьшается, прежде всего, в начальный период. При $\lambda = 0$ и $\tau \rightarrow \infty$ он становится равным потоку массы, поступающему из источника: $\Psi_r(t) \rightarrow 1$.



а)



б)

Рис. 3.22. Изменение относительного массопотока Ψ_r во времени τ :
 а) при различной интенсивности поглощения на водоупоре $\gamma = 50$ (1),
 $\gamma = 1$ (2), $\xi = 0,8$ (обычные кривые), $\xi = 0,2$ (жирные кривые);
 б) при различной скорости распада радионуклида $\lambda = 0$ (1),
 $\lambda = 10^{-5} \text{ сут}^{-1}$ (2), $\lambda = 5 \cdot 10^{-5} \text{ сут}^{-1}$ (3), $\xi = 0,5$, $\gamma = 1$.

Сорбция на нижней границе оказывает большее влияние на величину Ψ_r , по сравнению с эффектом заглуплением источника. С ростом λ величина Ψ_r уменьшается: при $\lambda = 5 \cdot 10^{-4} \text{сут}^{-1}$ в стационарном режиме более половины общего количества вещества распадается, не выходя за пределы водоносного горизонта (кривая «3»).

Таким образом, необратимая сорбция в подошве пласта приводит к существенному сокращению размеров зоны распространения вещества, уменьшению его концентрации и более быстрому установлению стационарного режима, что необходимо учитывать при прогнозах массопереноса в подземных водах.

Пример 7. Как правило, растворенные вещества поступают в подземные воды после миграции в зоне аэрации. Поэтому свойства пород ненасыщенной зоны существенно влияют на интенсивность массопотока в верхний водоносный горизонт. Роль зоны аэрации как естественного барьера состоит в предотвращении попадания радионуклидов в водоносный горизонт или в значительном ослаблении интенсивности их поступления в грунтовые воды. Обычно изменение массопотока через зону аэрации моделируется с помощью численных методов [65]. Изложенная ниже модель [122] позволяет в первом приближении с помощью аналитических методов учесть защитные свойства пород зоны аэрации и оценить риск попадания РВ в грунтовые воды.

При построении математической модели принимаются следующие допущения. Источник поступления раствора из захоронений РАО расположен на дневной поверхности или несколько ниже ее. Переменный во времени исходный массопоток направлен вертикально вниз. Вещество вместе с нисходящим потоком влаги проникает через ненасыщенный верхний слой; при этом величина массопотока снижается вследствие сорбции и распада. Водоносный горизонт считается на порядок более проницаемым, чем залегающий сверху слой пород, поэтому после поступления в подземные воды вещество распространяется преимущественно в горизонтальном направлении. Относительно небольшой объем растворов, просачивающихся сверху, практически не изменяет динамику влагопереноса в зоне аэрации и фильтрации в водоносном горизонте.

Наиболее важным параметром миграции в ненасыщенной зоне является скорость вертикального влагопереноса $v_{z,1}$. Согласно результатам экспериментальных исследований [65], значения $v_{z,1}$ в верхних слоях почв и грунтов на глубине более 4-5 м можно принимать постоянными, а саму скорость – направленной вниз за исключением небольшо-

го поверхностного слоя ниже дневной поверхности. Фильтрационный поток в общем случае считается трехмерным, хотя допустимо использование двумерной модели горизонтального массопереноса. На кровле водоносного горизонта формулируется условие баланса массы в виде соотношения эквивалентности потока вещества, выходящего из зоны аэрации, и потока вещества, направленного в водоносный горизонт.

Сформулированным предпосылкам и допущениям соответствует модель массопереноса в трехмерном фильтрационном потоке при условиях постоянства гидрофизических и физико-химических параметров или квазиоднородности водоносных пород, представленная соотношениями (2.106) и (2.112). Определив концентрацию на нижней границе зоны аэрации, можно в соответствии с выражением (2.1) определить поток вещества, поступающего через кровлю водоносного горизонта в подземные воды. Вынос вещества за пределы области фильтрации рассчитывается по формулам (2.114) – (2.120).

Исходный массопоток Ψ_0 через дно захоронения, с которым совмещена горизонтальная плоскость $z = 0$, равен

$$\Psi_0(x, y, t) = -D_{z,1} \frac{\partial C_1}{\partial z} + v_{z,1} C_1 = \begin{cases} \psi_0(t), & (x, y) \in \bar{\Omega}, \\ 0, & (x, y) \notin \bar{\Omega}; \end{cases}$$

где C_1 – концентрация вещества в поровом растворе в породах зоны аэрации, ψ_0 – удельный массопоток, $\bar{\Omega}$ – горизонтальная область поступления вещества через дно захоронений, аппроксимируемая с помощью прямоугольников или многоугольников.

На верхней границе водоносного горизонта задается массопоток Ψ_1

$$\Psi_1(x, y, t) = -D_z \frac{\partial C}{\partial z} + v_z C = \begin{cases} \psi_1(t), & (x, y) \in \Omega, \\ 0, & (x, y) \notin \Omega; \end{cases}$$

где C – концентрация вещества в подземных водах, ψ_1 – удельный массопоток через кровлю водоносного горизонта, Ω – горизонтальная область поступления вещества в водоносный горизонт.

Приближенная оценка Ψ_1 может быть получена следующим образом. Уравнение (2.101) решается при условиях (2.102) и $\partial C_1 / \partial z = 0$ при $z \rightarrow \infty$. Окончательный вид решения формально определяется выражениями (2.106) и (2.112), причем $v_x = v_y = 0$. Согласно сделанным в разделе 2.4 допущениям считается, что массоперенос в подземных водах практически не сказывается на вертикальной миграции в поверхност-

ном слое. Тогда принимается, что поступающий из зоны аэрации массопоток q_1 эквивалентен массопотоку Ψ_1 , поступающему в водоносный горизонт через его кровлю в горизонтальном сечении $z=L$

$$\Psi_1(x, y, t) = q_1(x, y, L, t) = \left(-D_{z,1} \frac{\partial C_1}{\partial z} + v_{z,1} C_1 \right) \Big|_{z=L}. \quad (3.9)$$

Определив C_1 по (2.106), можно получить аналитическое выражение для q_1 из (2.27) с помощью (2.1).

Для оценки площади, через которую вещество поступает в водоносный горизонт, необходимо количественно оценить влияние поперечной диффузии на расширение зоны распространения вещества в горизонтальном сечении на кровле водоносного горизонта. В качестве типичного примера можно рассмотреть поверхностный слой толщиной $L = 10$ м. Пусть $T = Ln_{e,1}/v_{z,1}$ – время конвективного переноса через этот слой; безразмерное число $Pe_{z,1} = v_{z,1}L/D_{z,1}$ характеризует соотношение между конвекцией и диффузией, параметр $\sigma = D_{x,1}/D_{z,1}$ отражает роль диффузии в поперечном направлении; $\bar{\lambda} = \lambda T$ представляет собой безразмерный параметр распада. Пусть также C_0 – исходная концентрация, которая определяется как отношение $\Psi_0(x, y, t)/v_{z,1}$, так что $C_0 = \psi_0/v_{z,1}$ в области $\bar{\Omega}$ и $C_0=0$ вне ее. Для удобства численного анализа интенсивность ψ_0 принимается равной единице.

Эффект расширения области распространения веществ в направлении, перпендикулярном скорости влагопереноса, можно оценить, например, вдоль оси Ox , приняв $D_{y,1} = 0$, $D_{z,1} = 0,001$ м²/сут, и $\sigma = 1$ (как правило, $\sigma < 1$). Пусть $\delta_{0,001}$ – дополнительный размер зоны распространения вещества в сечении $z = L$, где концентрация превышает 0,1% от исходной, по сравнению с размером $\bar{x}_2 - \bar{x}_1$ источника вещества на поверхности $z = 0$. Формально величина $\delta_{0,001}$ определяется по следующему правилу: неравенство $C_1(x, y, L, T) \geq 0,001C_0$ имеет место для всех x, y , которые удовлетворяют соотношениям $(\bar{x}_1 - \delta_{0,001}) \leq x \leq (\bar{x}_2 + \delta_{0,001})$ и $\bar{y}_1 \leq y \leq \bar{y}_2$. Величина $\delta_{0,01}$ определяется аналогично.

Значения $\delta_{0,001}$, вычисленные указанным способом, изменяются в диапазоне от 2,5 до 10,3 м, а $\delta_{0,01}$ – от 0,15 до 6,6 м, если $T_{1/2}=20$ лет при $Pe_{z,1} = 10-100$, $n_{e,1} = 1-5$, а период времени $T = 1000-50000$ сут. Чем

продолжительнее миграция вследствие меньшей скорости $v_{z,1}$, тем более широкой становится зона распространения вещества. С другой стороны, увеличение $\bar{\lambda}$ за счет ускорения распада или увеличения длительности миграции приводит к сужению этой зоны. Вычисленные значения $\delta_{0,001}$ и $\delta_{0,01}$ показывают, что влиянием поперечной диффузии для захоронений значительной площади (десятки и сотни гектар) можно пренебречь.

Таким образом, для определения интенсивности поступления веществ в водоносный горизонт достаточно решить задачу одномерного массопереноса, приняв $D_{x,1} = D_{y,1} = 0$ и подставив $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{y}_1, \bar{y}_2$ вместо x_1, x_2, y_1, y_2 соответственно. В этом случае Ψ_1 вычисляется согласно формуле (3.9), а $C_1(z, t)$ – согласно (2.82), где следует задать $C_x=1, C_y=1$.

Защитные свойства верхнего почвенного слоя в зоне аэрации характеризуются: 1) задержкой во времени миграции радионуклидов вследствие удлинения пути миграции, 2) уменьшением потока массы вещества вследствие распада.

Оценку этих параметров можно продемонстрировать на следующем примере, приняв $\psi_0 = 1$ Бк/(м²·сут) и типичные значения параметров верхнего почвенного слоя: $L = 10$ м, $D_{z,1} = 0,001$ м²/сут, $Pe_{z,1} = 10$. Для этого рассчитывается максимальный массопоток ψ_{max} через сечение $z = L$ в долях ψ_0 ; а также величины $\theta_{0,001}, \theta_{0,01}, \theta_{0,1}$, где $\theta_\beta = t_\beta/T, t_\beta$ – момент времени, после которого $q_1 \geq \beta \psi_0$. Соотношение $\theta_\beta = \infty$ означает, что $\psi_{max} \leq \beta \cdot \psi_0$. Результаты расчетов приведены на рис. 3.23, где кривым «1», «2», «3» соответствуют величины $\theta_{0,001}, \theta_{0,01}, \theta_{0,1}$.

С увеличением $\bar{\lambda}$ уменьшается ψ_{max} и увеличивается θ_β , что означает увеличение задержки во времени перед началом поступления вещества в грунтовые воды. Можно условно считать, что водоносный горизонт практически не имеет защиты от поступления радионуклидов сверху, если $\bar{\lambda} < 0,5$, поскольку $\psi_{max} \geq 0,5 \psi_0$. Величина ψ_{max} уменьшается по экспоненциальной зависимости, а θ_β одновременно увеличивается, если $\bar{\lambda} \rightarrow \infty$. Значения $\bar{\lambda}$ при одном и том же λ и L увеличиваются с ростом $n_{e,1}$ или уменьшением $v_{z,1}$. Фактор распада в наибольшей степени влияет на миграцию в слабопроницаемых породах с высокой сорбционной емкостью, поэтому защитные свойства верхнего слоя существенно зависят от параметров T и $\bar{\lambda}$.

Это подтверждает следующий расчет. Песчаный водоносный горизонт большой мощности характеризуется такими параметрами: компоненты скорости фильтрации: $v_x = -0,1$ м/сут, $v_y = 0$, $v_z = 0,01$ м/сут; коэффициенты гидродисперсии $D_x = 0,2$ м²/сут, $D_y = 0,06$ м²/сут, $D_z = 0,06$ м²/сут; эффективная пористость $n_e = 1,0$; период полураспада $T_{1/2} = 29$ лет (для ⁹⁰Sr). Значения $D_{z,1} = 0,001$ м²/сут, $D_{x,1} = D_{y,1} = 0$, и $v_{z,1} = 0,01$ м/сут приняты для пород менее проницаемого верхнего слоя толщиной $L = 10$ м. Поверхностный прямоугольный источник поступления вещества постоянной интенсивности $\psi_0 = 2$ Бк/(м²сут) на поверхности земли имеет координаты, м: $x_1 = 200$, $x_2 = 240$, $y_1 = 100$, $y_2 = 140$. Пусть также $x = 0$ – граница контакта поверхностных и подземных вод, на которой принято условие (2.79).

Пусть $T_a = x_1/(v_x/n_e)$ – продолжительность конвективного переноса к границе $x = 0$. На рис. 3.24 показана динамика изменения во времени $\tau = t/T_a$ относительного массопотока в поверхностные воды $\Psi(\tau) = \bar{\Psi}_s(\tau)/\Psi_0$ (сплошные кривые) и в горизонт грунтовых вод $\psi_1(\tau)$ (штриховые кривые). Здесь $\Psi_0 = \psi_0(x_2 - x_1)(y_2 - y_1)$ – исходный массопоток, поступающий из источника. Рассмотрены следующие варианты исходных данных: 1) $n_e = 5,0$, $\lambda = 0$ (нерадиоактивное вещество); 2) $n_e = 5,0$, $T_{1/2} = 28$ лет; 3) $n_e = 7,0$, $T_{1/2} = 28$ лет.

Анализ графика позволяет определить задержку во времени между моментами начала поступления вещества в грунтовые воды и в водоток. Поскольку исходный массопоток задан постоянным, то интенсивность выноса вещества из водоносного горизонта достигает постоянной величины. При отсутствии распада ($\lambda = 0$) при обратимой сорбции поток вещества в поверхностные воды $\psi_s(\tau)$ приближается к $\psi_1(\tau)$ и со временем должен стать равным потоку вещества, поступающего из источника (кривые «1»). Распад существенно меняет процесс: $\psi_s(\tau) < \psi_1(\tau) < 1$. Разница между $\psi_1(\tau)$ при $\lambda = 0$ и $\psi_1(\tau)$ при $\lambda > 0$ (кривые «1» и «2») показывает уменьшение массопотока вследствие распада в зоне аэрации. Разница $\psi_1(\tau) - \psi_s(\tau)$ (кривые «2» и «3») соответствует уменьшению массопотока вследствие распада в фильтрационном потоке. Эти величины характеризуют защитные свойства водоносного горизонта как естественного барьера, который уменьшает уровень радиоактивного загрязнения поверхностных вод или предотвращает его.

На рис. 3.25 показаны прогнозные контуры зоны распространения вещества в вертикальном сечении фильтрационного потока при

$y = 120$ м. Границы зоны определены по критерию превышения допустимой концентрации ^{90}Sr . Результаты моделирования подтверждают исключительно важную роль вертикальной миграции в верхнем слое: интенсивная сорбция в зоне аэрации существенно тормозит распространение радионуклида в грунтовых водах. В данном примере длина зоны распространения вещества на 100 – 120 м больше при $n_{e,1} = 5$, чем при $n_{e,1} = 7$ в те же моменты времени. При отсутствии распада размеры этой зоны на 30 – 40% больше, чем для радионуклида. Направленная вниз конвекция ($v_z > 0$) приводит к заглоблению положения максимума концентрации в любом вертикальном сечении.

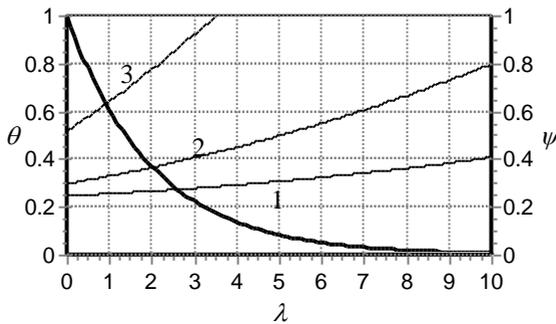


Рис. 3.23. Изменение массопотока при миграции через верхний почвенный слой вследствие сорбции и распада.

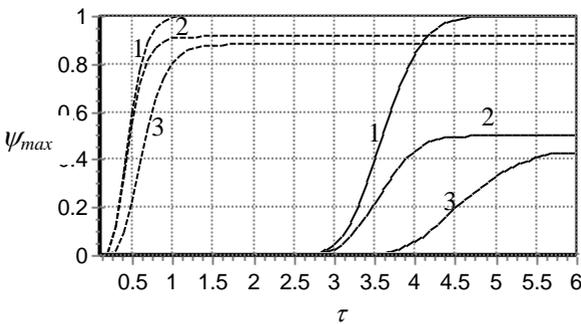


Рис. 3.24. Динамика массопотока Ψ во времени τ в подземные и поверхностные воды; номера кривых соответствуют вариантам расчета.

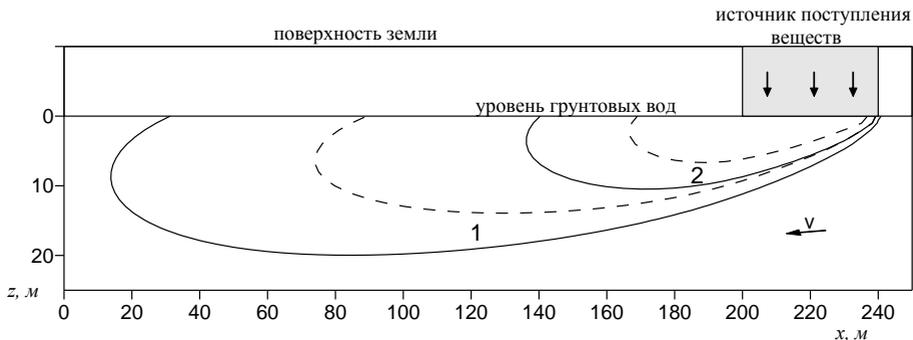


Рис. 3.25. Контуры зоны с превышением допустимой концентрации при различных параметрах сорбции и распада в верхнем слое в момент времени 20 лет: 1) $n_{e,1}=5,0$, 2) $n_{e,1}=7,0$, сплошные кривые – $\lambda=0$, штриховые кривые – $T_{1/2}=29$ лет.

Изложенная модель удобна в практическом использовании для рационального выбора мест размещения приповерхностных захоронений токсичных отходов.

3.5. Прогноз миграции радионуклидов в подземных водах зоны ЧАЭС

Возможности использования полученных аналитических решений уравнения массопереноса продемонстрированы на примерах прогноза миграции радионуклидов в подземных водах в зоне ЧАЭС.

Пример 1. Рассматривается прилегающая к станции территория, где расположены пункты временной локализации радиоактивных отходов (ПВЛРО) траншейного типа (рис. 3.26).

Для данного участка ранее в [20] был выполнен прогноз миграции ^{90}Sr методом сеток на основе численной одномерной модели массопереноса РВ в водонасыщенных пористых средах [109]. Задача решалась с использованием криволинейной координаты, отсчитываемой вдоль лент тока фильтрационного потока, построенных по результатам натуральных наблюдений. В указанной модели участки захоронения РАО рассматривались как непрерывно действующие источники с конечным запасом вещества, интенсивность которых описывалась аналогично

соотношениям (2.23). Прогноз был выполнен при следующих значениях параметров переноса: $D_x = 0,4 \text{ м}^2/\text{сут}$, $v_x = 0,04 \text{ м}/\text{сут}$, причем скорость фильтрации направлена в сторону р. Припять. Рассматривались «пессимистический» вариант ($n_e = 1,05$, $T_{pv} = 5$ лет) и «вероятный» вариант ($n_e = 3,45$, $T_{pv} = 10$ лет).

Рассматриваемые гидрогеологические условия характеризуются значительным превышением горизонтальных размеров источников по сравнению с вертикальными, квазиоднородной структурой верхнего водоносного горизонта, общим направлением скорости фильтрации к поверхностному водотоку. Поэтому для прогноза миграции ^{90}Sr в подземных водах и оценки радиоактивного загрязнения р. Припять допустимо применение расчетной схемы пласта-полуплоскости и пласта-квадранте, границы которых представляют собой контакт подземных и поверхностных вод, причем $v_x = -0,04 \text{ м}/\text{сут}$, $v_y = 0$. В отличие от [20] учитывается поперечная дисперсия, значение которой D_y принято равным $0.1 D_x$ или $0,04 \text{ м}^2/\text{сут}$, что соответствует составу пород в области миграции (пески различной зернистости). На основании натурных наблюдений, проводившихся в зоне ЧАЭС [78], средняя мощность водоносного горизонта m_0 принята равной 20 м.

Прогноз миграции ^{90}Sr выполнен для наиболее близких к р. Припять ПВЛРО «Припять», «Нефтебаза», «Песчаное плато»; схематизация захоронений РАО выполнена отдельно для каждого из них с учетом их конфигурации и положения границ области фильтрации (табл. 3.1). Интенсивность поступления ^{90}Sr в подземные воды на ПВЛРО определялась по формуле (2.23). Расчеты проведены по формулам (2.82), (2.116). Время отсчитывалось с момента подтопления ПВЛРО после отключения дренажа в зоне ЧАЭС.

Согласно результатам прогноза, максимальные концентрации ^{90}Sr в подземных водах, осредненные по мощности водоносного горизонта, превысят для «пессимистического» варианта на ПВЛРО «Припять» и «Нефтебаза» $0,8n \cdot 10^{-9}$ Ки/л в период с 14 по 16 лет, на «Песчаном плато» – $2,3n \cdot 10^{-8}$ Ки/л в период с 11 по 19 лет. Для «вероятного» варианта эти значения составят на ПВЛРО «Припять» и «Нефтебаза» $1,8n \cdot 10^{-10}$ Ки/л в период с 17 по 28 лет, на «Песчаном плато» – $5,0n \cdot 10^{-8}$ Ки/л в период с 16 по 24 года. Таким образом, значения удельной активности подземных вод на участках ПВЛРО в период 1997 – 2014 гг. могут значительно превысить ДКБ по ^{90}Sr .

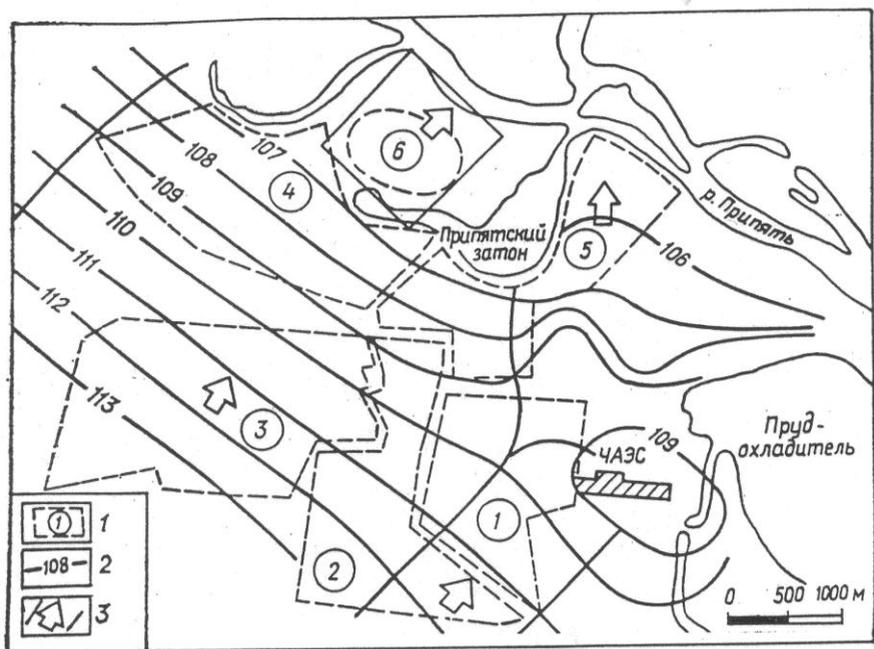


Рис. 3.26. Схема расположения ПВЛРО вблизи ЧАЭС [20]:
 1) границы и номера ПВЛРО (1 – «Стройбаза», 2 – «Рыжий лес»,
 3 – «Янов», 4 – «Припять», 5 – «Нефтебаза», 6 – «Песчаное плато»);
 2) гидроизогипсы грунтового горизонта (на май 1992 г);
 3) ленты тока и направления движения грунтовых вод.

Таблица 3.1
 Параметры источников поступления ^{90}Sr в подземные воды из ПВЛРО

№	Координаты, м				ПВЛРО	Исходная актив- ность ^{90}Sr , Ки, *
	x_1	x_2	y_1	y_2		
1	300	1000	100	1000	«Песчаное плато»	$n \cdot 10^3$
2	100	1100	100	900	«Припять»	$n \cdot 10^2$ (суммарно)
3	100	1100	100	1300	«Припять»	
4	100	1500	100	900	«Нефтебаза»	$n \cdot 10^2$ (суммарно)
5	100	900	100	1100	«Нефтебаза»	

* n – оцениваемое по данным мониторинга число от 1 до 10.

В табл. 3.2 полученные автором значения поступления ^{90}Sr в р. Припять с подземным стоком сравниваются с результатами прогноза, полученными в [20]. В целом можно отметить удовлетворительное согласование между результатами, полученными разными методами. Определенные расхождения могут быть вызваны как погрешностями численного решения, так и приближенностью описания источников. Следует отметить, что расчет поступления ^{90}Sr в поверхностные воды аналитическим методом не требует вычисления концентрации радионуклида в подземных водах, что является обязательным для численных методов.

Результаты прогноза свидетельствуют о том, что даже в неблагоприятных условиях суммарный вынос ^{90}Sr с подземным стоком не превысит $n \cdot 10$ Ки/год. Поскольку средний расход р. Припять составляет $460 \text{ м}^3/\text{с}$, то активность ее вод ниже района ЧАЭС может увеличиться не более чем на $n \cdot 10^{-12}$ Ки/л, что гораздо ниже ДКБ. Следовательно, миграция ^{90}Sr в р. Припять не представляет значительной экологической опасности. В то же время, результаты прогноза должны постоянно уточняться данными радиоэкологического мониторинга в зоне ЧАЭС.

Пример 2. Рассматривается миграция ^{90}Sr , ^{137}Cs , ^{239}Pu в подземных водах зоны ЧАЭС в районе возможного расположения централизованного хранилища отработавшего ядерного топлива реакторов ВВЭР АЭС Украины в зоне ЧАЭС.

Таблица 3.2

Поступление ^{90}Sr в р. Припять в % от его исходной активности в ПВЛРО

Период, лет	«Припять»	«Нефтебаза»	«Песчаное плато»
0 – 10	0,8/0 (4,4/0,8)	1,2/0 (5,2/0,9)	0/0 (0/0)
10 – 20	3,5/0,1 (6,7/1,5)	5,4/0,1 (7,9/1,7)	0,4/0 (0,2/0)
20 – 30	3,7/0,3 (5,9/1,5)	5,8/0,5 (7,0/1,8)	2,3/0 (2,3/0)
30 – 40	3,1/0,5 (4,8/1,3)	4,9/0,7 (5,7/1,5)	3,3/0 (4,3/0)
40 – 50	2,5/0,5 (3,8/1,1)	3,9/0,7 (4,5/1,3)	3,2/0 (4,3/0)

В скобках приведены результаты расчета из [20].

Числитель – расчет по «пессимистическому» варианту, знаменатель – по «вероятному» варианту.

Схема и геологический разрез района расположения объекта приведены на рис. 3.27, 3.28. Областью миграции является практически незащищенный сверху первый от поверхности водоносный горизонт средней мощностью до 35 м. Он представлен верхнечетвертичными кварцевыми песками и залегает на водоупоре из киевских мергельных глин, сплошность которого в ряде мест нарушена.

Для рассматриваемых условий правомерно осреднение фильтрационных и гидрогеохимических параметров. Участком размещения объекта является водораздел, поэтому фильтрационный поток в данном районе направлен как в сторону р. Припять, так и ее притока р. Уж, которые являются естественными границами области миграции.

При расчете приняты максимальные значения скорости фильтрации: $6,25 \cdot 10^{-3}$ м/сут в сторону р. Припять и $5,0 \cdot 10^{-3}$ м/сут в сторону р. Уж, коэффициенты гидродисперсии $D_x = D_y = 5,0 \cdot 10^{-3}$ м²/сут. Оцененные минимальные значения коэффициента эффективной пористости n_e для Sr, Cs и Pu составляют 1,25, 87,7 и 39,5 соответственно. Такое сочетание параметров отвечает «пессимистическому» сценарию гипотетического радиоактивного загрязнения подземных вод в данном районе.

При схематизации массопереноса приняты следующие допущения: 1) правомерно использовать плановую модель, поскольку горизонтальные размеры области и источника на 2 – 3 порядка выше их вертикальных размеров; 2) влияние границ считается несущественным ввиду значительной удаленности их от объекта; 3) Sr, Cs и Pu равномерно распределены на объекте, а перенос каждого из них происходит независимо друг от друга; 4) объект рассматривается как непрерывно действующий источник.

Согласно «пессимистическому сценарию», поступление РВ в подземные воды возможно на всей территории объекта, форма которого в плане представляет собой прямоугольник размерами 4×5 км. Изменение интенсивности источника во времени определяется по (2.23) с периодом полувыведения $T_{pv} = 5$ лет.

Часть области, занимаемая объектом, расположена на водоразделе, где горизонтальные скорости фильтрации близки к нулю. Поэтому участок поступления РВ в подземные воды разбивается на подобласти, для каждой из которых прогноз выполняется отдельно, со своим значением скорости фильтрации.

Результаты прогноза миграции радионуклидов в водоносном горизонте I, выполненного в соответствии с расчетной схемой неограничен-

ного в плане пласта по формуле (2.39), представлены на рис. 3.27 – 3.31. Значения концентрации приведены в долях от первоначальной плотности распределения радионуклидов на объекте, отнесенной к мощности водоносного горизонта.

На рис. 3.27 вокруг объекта в плане обозначены контуры зоны с концентрацией Sr, превышающей 10^{-6} при $t = 10^5$ сут. Границы указанной зоны удалены от объекта по потоку на расстояние не более 700 м. За этот же период продвижение Pu с концентрацией свыше 10^{-6} составит 28 м в сторону р. Припять и 24 м в сторону р. Уж. Максимальная относительная концентрация Cs за пределами мест его поступления в водоносный горизонт в прилегающей к нему узкой полосе шириной до 20 м не превысят к этому моменту $5,2 \cdot 10^{-7}$.

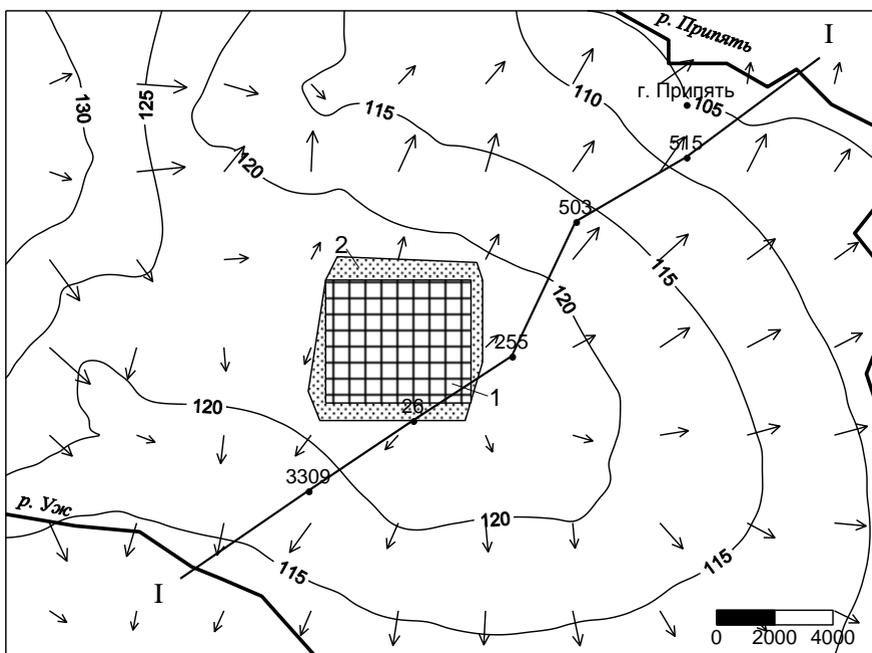


Рис. 3.27: Схема размещения объекта по хранению РАО в зоне ЧАЭС: 1 – участок размещения объекта, 2 – зона прогнозируемого распространения ^{90}Sr в подземных водах, — 120 — уровни грунтовых вод; «26» – контрольные скважины; I – I – геологический разрез.

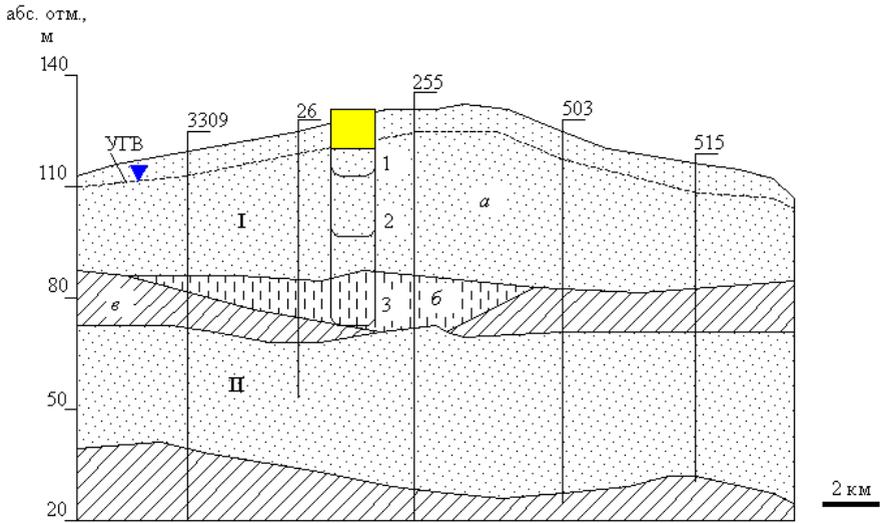


Рис. 3.28. Геологический разрез «I–I» на участке расположения объекта: «а» – песок, «б» – породы водоупора с повышенной проницаемостью, «в» – суглинки и глины; I – верхний, II – нижний водоносный горизонт; «255» – номера скважин; 1, 2, 3 – прогнозируемые контуры зон распространения Cs (1), Pu (2) и Sr (3) по глубине разреза.

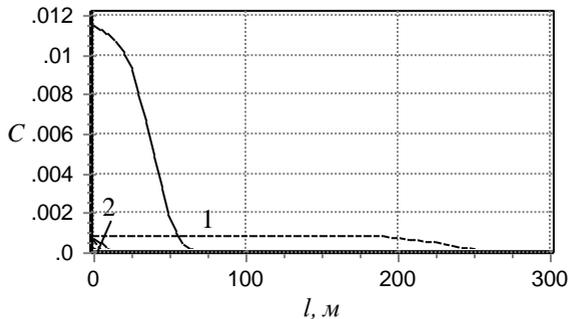


Рис. 3.29. Изменение концентрации ^{90}Sr (1) и ^{239}Pu (2) вдоль профиля АВ (рис. 3.28); сплошные линии – при 10000 сут, штриховые – при 50000 сут.

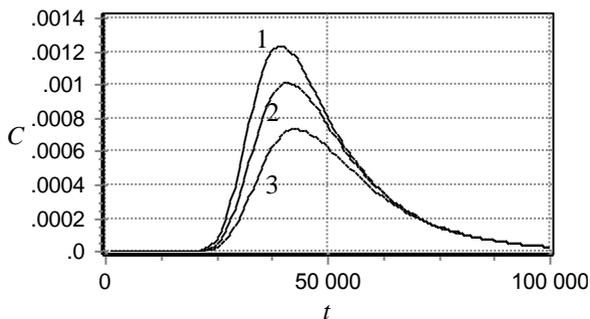


Рис. 3.30. Изменение относительной концентрации ^{90}Sr во времени на удалении 100 м от мест утечек при различных значениях T_{pv} , лет: 5 (1), 10 (2), 20 (3).

Влияние распада приводит к падению концентрации наиболее мобильного Sr по мере его продвижения, в то время как Pu, и тем более Cs, в силу их высокой сорбируемости практически не распространяются в подземных водоносных горизонтах (рис. 3.29). Увеличение периода полувыведения T_{pv} в случаях «2» и «3» приводит к снижению концентрации Sr в подземных водах (рис. 3.30). При рассмотренных вариантах максимальные значения концентрации Sr на удалении 100 м от мест утечек составят около 0,1% от исходной в источнике.

Наряду с прогнозом миграции в горизонтальном направлении оценена возможность поступления радионуклидов во второй от поверхности водоносный горизонт «II» вследствие вертикальной миграции на участках нарушения сплошности водоупора. В этих зонах параметры n_e , D_x , D_y принимают указанные ранее значения, также принимается $D_z = D_x = D_y$. Расчеты выполнены по формуле (2.106), в которой член C_z вычисляется по формуле (2.110). Расчеты проведены для случая, когда хранилища заглублены в водоносный горизонт на 3 м ($z_1 = 0$ м, $z_2 = 3$ м), а скорость вертикального переноса v_z соответствует инфильтрационному питанию 150 мм/год. Предполагается отсутствие зон трещиноватости и повышенной проницаемости ниже мест утечек.

На рис. 3.28 показаны контуры зон с превышением концентраций Cs (1), Pu (2) и Sr (3) более чем 10^{-6} в результате их вертикальной миграции спустя 300 лет (для Cs и Pu) и 35 лет (для Sr). Продвижение Cs и Pu составит 9 и 24 м соответственно, что фактически исключает возможность их попадания в водоносный горизонт «II». В концентрациях

свыше 10^{-6} Sr начнет поступать в нижний водоносный горизонт (на глубину 50 м) спустя 35 лет.

Согласно прогнозу, значения его концентрации достигнут там максимума ($4.1 \cdot 10^{-4}$) в период 110 – 125 лет после начала утечек, а к 137 годам они снизятся до $3 \cdot 10^{-5}$. Таким образом, нельзя исключать возможность проникновения ^{90}Sr в нижний водоносный горизонт, однако даже в зонах нарушения сплошности водоупора массопоток будет весьма незначительный и лишь спустя длительный период после возможных утечек.

Полученные результаты дают основание утверждать, что радиоактивное загрязнение подземных вод в случае размещения на данной территории объекта по хранению РАО не распространится до рек Припять и Уж вследствие большой удаленности объекта от границ области фильтрации (6 и 10 км). Данный вывод основывается на результатах моделирования по «пессимистическому» сценарию, т. е. при неблагоприятном сочетании факторов процесса.

Ввиду относительной малости зоны прогнозируемого распространения радионуклидов в верхнем водоносном горизонте проведение защитных мероприятий по охране поверхностных вод на данный момент является нецелесообразным. Основную опасность на данном объекте может представлять вертикальная миграция ^{90}Sr в нижележащий водоносный горизонт. Поэтому потенциально опасные источники поступления РВ в подземные воды следует размещать только на участках с хорошо развитым водоупором.

3.6. Прогнозирование миграции радионуклидов в зоне влияния хвостохранилища отходов переработки урановых руд*

Хвостохранилище «С» находится на правом берегу р. Днепр (расстояние до реки около 5 км), в 4,5 км юго-восточнее г. Дніпродзержинска. Оно образовано устройством перегораживающих балку земляных плотин и состоит из двух последовательно расположенных секций. Общая протяженность объекта составляет около 4,8 км, а площадь земель под ним – 492 га. В геоморфологическом отношении хвостохранилище находится в пределах водораздельного плато в левом

* В работе над данным разделом участвовали О.Л. Анищенко и Г.Г. Шматков.

отвержке балки Рассоловатая, входящей в овражно-балочную сеть бассейна р. Сухая Сура. Воздействие хвостохранилища испытывают два водоносных горизонта – первый от поверхности четвертичный и второй – неогеновый. Влияние объекта на четвертичный горизонт лессового состава пород локализовано ввиду сходящегося характера фильтрационного потока к чаше хвостохранилища.

В первой секции, заполнявшейся с 1968 по 1983 гг., содержится около 8,5 млн. м³ шламов и 107 тыс. м³ воды. Пульпа, покрытая водой, занимает площадь 540,8 тыс. м². Площадь открытых сухих пляжей составляет 138,4 тыс. м². Вторая секция введена в эксплуатацию в 1983 году. Проектный объем заполнения составляет 19,2 млн. м³ отходов. По состоянию на 31.12.1998 г. отметка заполнения второй секции составляла 112,1 м, а объем заполнения – 8741,4 тыс. м³, из которых 5464,6 тыс. м³ приходилось на шламы, а 3276,8 тыс. м³ – на воду [41].

В днище I-й секции в пределах «литологического окна» выполнен грунтово-битумный экран для уменьшения фильтрационных потерь из хвостохранилища. В донной части балки II-й секции также имеются «окна», где отсутствует естественный водоупор. Для предотвращения утечек из хвостохранилища созданы противofильтрационные сооружения (ПФЗ). Верхние и нижние ПФЗ врезаны на глубину 1 м в водоупорные глины и замыкаются между собой в пределах плотин обеих секций. ПФЗ заполнены бентонитовым раствором и каолиновой глиной.

Поток в неогеновом водоносном горизонте под хвостохранилищем характеризуется значительной изменчивостью (рис. 3.31). Течение под секцией «II» имеет расходящийся характер, что определяет несколько направлений миграции. Вместе с тем, скорость фильтрации на этом участке в несколько раз меньше, чем в районе первой секции, где поток подземных вод направлен преимущественно на север. Такая картина обусловлена изменением свойств пород и мощности неогенового горизонта, неравномерным растеканием шламовых вод. Среднее значение коэффициента фильтрации пород неогенового горизонта составляет 6,5 м/сут [41].

Анализ имеющихся данных по содержанию радионуклидов, микро- и макрокомпонентов указывает на то, что размеры зоны миграции в неогеновом горизонте в плане достигают несколько сотен метров. Существующая сеть наблюдений не полностью охватывает все направления возможной миграции, а гидрохимические опробования проводятся редко.

Согласно данным мониторинга, поток в верхнем водоносном горизонте направлен в сторону хвостохранилища; при этом он маломощный и практически не используется для водоснабжения. Наиболее важным для использования и одновременно незащищенным от поступления загрязняющих веществ является второй от поверхности неогеновый водоносный горизонт. Изменение состава подземных вод в нем происходит вследствие нисходящей фильтрации шламовых вод через днище хвостохранилища. Далее растворенные вещества мигрируют в сторону р. Днепр к водозаборам ближайшего населенного пункта. Область массопереноса схематизируется в виде трехслойной толщи пород аналогично рис. 2.2.

Слой остаточных продуктов переработки урановых руд с преобладанием песчаных и супесчаных фракций подстилается слоем суглинков, а в местах отсутствия водоупора – искусственным грунтово-битумным экраном. Ниже суглинков в неогеновом горизонте расположен слой песка выше уровня воды. В нижней части секции «II» уровень неогенового горизонта находится в толще суглинков. В соответствии с принятой расчетной схемой на верхней границе пород, подстилающих отходы, задается концентрация веществ в шламовых водах.

Поле скоростей фильтрации в неогеновом горизонте определено на основании данных об уровне подземных вод. Прогноз миграции радионуклидов выполнен аналогично токсичным микрокомпонентам Be, Cd и Pb [2] с учетом фильтрационной неоднородности (раздел 2.4). Секции хвостохранилища аппроксимировались площадными источниками треугольной формы, расчет по которым производился по формуле (2.51). В ходе прогнозирования адекватно и с необходимой детальностью учитывались основные факторы, определяющие миграцию радионуклидов: расположение хвостохранилища, его форма, сроки заполнения, состав шламовых вод, параметры буферных защитных слоев, фильтрационные и миграционные свойства пород, неоднородность водоносных пород.

В состав складированных хвостов, наряду с нерадиоактивными токсичными веществами, входят компоненты цепочки распада, образованной естественным ураном, главным образом изотопы ^{238}U , ^{226}Ra , ^{210}Pb , ^{210}Po . Наибольшие запасы РАО сосредоточены в первой секции, где их суммарная активность составляет $7,1 \cdot 10^{14}$ Бк; во второй секции этот показатель в несколько раз меньше. Повышение радиоактивности шламовых вод обусловлено преимущественно тремя элементами: ^{238}U , ^{210}Pb и ^{210}Po (табл. 3.3).

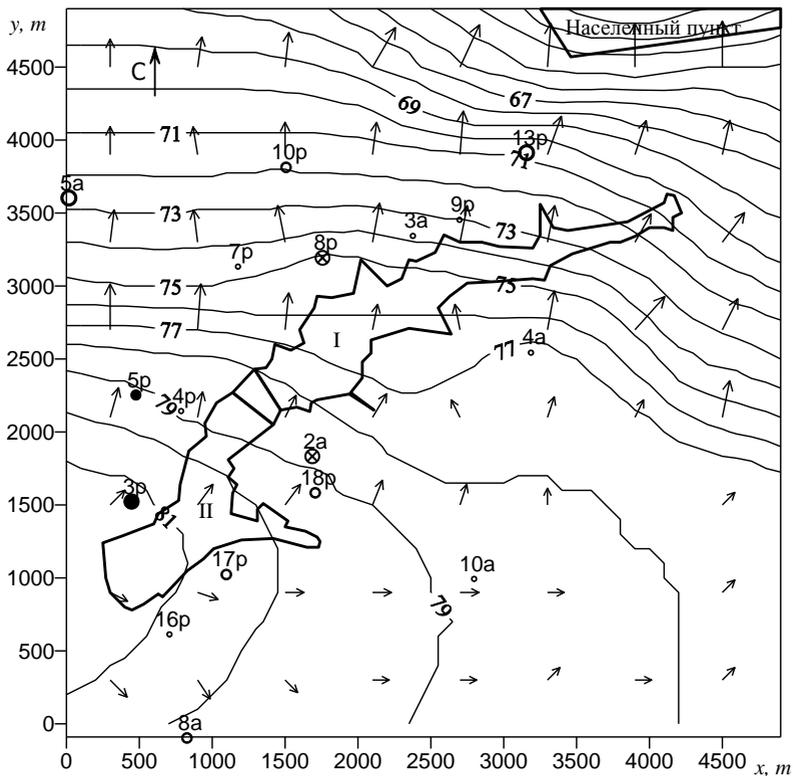


Рис. 3.31. Результаты радиохимического анализа подземных вод в зоне влияния хвостохранилища: «I», «II» – номера секций, → – направления фильтрации, —75— – уровень подземных вод в неогеновом горизонте, «3а» – номер одной из наблюдательных скважин.

Таблица 3.3

Содержание радионуклидов в шламовых водах по результатам гидрохимических исследований в 1997 – 2001 гг. (в долях ДКБ)

	^{238}U			^{210}Pb			^{210}Po		
	мин.	макс.	сред.	мин.	макс.	сред.	мин.	макс.	сред.
I секция	0,003	0,16	0,069	0,26	5,9	2,54	0,23	4,4	1,1
II секция	0,003	0,21	0,081	0,15	9,9	1,91	0,15	0,33	0,21

Содержание изотопов ^{238}U , ^{210}Pb и ^{210}Po в верхнем горизонте, за исключением одной скважины вблизи контура хвостохранилища, находится на уровне фоновых значений. Однако содержание этих радионуклидов в воде неогенового горизонта, согласно результатам гидрохимического опробования на конец 2001 г., превышает в некоторых скважинах фоновые значения (рис. 3.31).

Символами \circ разного размера обозначены скважины, где суммарный коэффициент концентрации ($K_{\text{сум}}$) радионуклидов не превышает $0,22 \cdot \text{ДК}_Б$, причем величина символа пропорциональна $K_{\text{сум}}$. Символом \otimes обозначены скважины, где $K_{\text{сум}} \approx 0,28 \cdot \text{ДК}_Б$, символом \bullet – скважина 5р, где $K_{\text{сум}} = 0,37 \cdot \text{ДК}_Б$ и скважина 3р, где $K_{\text{сум}} = 0,63 \cdot \text{ДК}_Б$. Обращают на себя внимание два обстоятельства: 1) мозаичный характер распределения радиоактивности, когда в удаленных скважинах обнаруживаются более высокие концентрации, чем в расположенных вблизи хвостохранилища пунктах наблюдения; 2) в целом невысокий уровень радиоактивности неогенового горизонта. Данные опробования указывают на то, что основным источником радиоактивности в неогеновом горизонте является ^{210}Pb и его элемент-спутник ^{210}Po . Неравномерность концентрации по площади существенно затрудняет калибровку математической модели в условиях отсутствия детальной информации о местах утечек из хвостохранилища.

Радиоактивные элементы, содержащиеся в шламовых водах, способны мигрировать в подземных водах на значительные расстояния. Наибольшая мобильность характерна для соединений урана, в частности, для нитрат-иона. Миграции урана способствует окисленная форма его соединений, характерная для данного хвостохранилища, присутствие в воде растворенного кислорода, ионов CO_2^- и HCO_3^- . По интенсивности водной миграции уран относится к таким подвижным элементам, как кальций, магний, натрий. В процессе фильтрации из хвостохранилища шламовые воды значительно обогащаются ураном, содержание которого может увеличиться на порядок. При определенных условиях дальность миграции урана может достигать нескольких километров.

Прогноз миграции в неогеновом горизонте был выполнен для изотопов ^{238}U , ^{210}Pb и ^{210}Po , которые представляют собой компоненты цепочки распада. В общем случае для этого могут использоваться модели, представленные в разделе 2.2. Однако анализ периодов полураспада этих изотопов позволяет применить более простые расчетные соотношения.

Между ^{238}U и ^{210}Pb в урановой руде на большом временном интервале устанавливается равновесие [19], при котором отношение концентраций этих элементов стабилизируется на определенном уровне. Для сравнительно коротких сроков прогноза (50–70 лет) дополнительное поступление ^{210}Pb за счет распада предшествующих ему долгоживущих компонент незначительно, причем как в шламовых, так и в подземных водах. Так, из соотношений для компонент цепочки распада следует, что за 50 лет дополнительное поступление ^{210}Pb за счет распада его долгоживущего предшественника ^{226}Ra не превысит 1.3% от концентрации последнего. Учитывая в целом низкие концентрации радия вблизи объекта, можно моделировать миграцию ^{210}Pb независимо от миграции ^{238}U , считая, что значительного пополнения радиоактивного свинца в отходах за счет распада предшествующих элементов не произойдет.

Для ^{210}Po с малым периодом полураспада (138,3 сут) миграцию из хвостохранилища на протяжении длительных сроков можно практически не учитывать. Основным его источником в подземных водах является мигрирующий там радиоактивный свинец. Если не принимать во внимание различие параметров сорбции ^{210}Po и ^{210}Pb , то после длительного периода времени отношение концентраций полония и свинца $\xi = C_{\text{Po}}/C_{\text{Pb}}$ должно составить около 0,017. Однако реальные значения ξ в скважинах неогенового горизонта варьируют от 0,012 до 0,225, составляя в среднем 0,104. Это может быть связано с различием параметров сорбции этих элементов, что учитывают модели, представленные в разделе 2.2. Для шламовых вод с кислой средой значения ξ еще больше, чем в подземных водах – от 0,27 до 0,54. При расчетах миграции содержание полония в подземных водах можно в первом приближении определить по концентрации ^{210}Pb , умножив ее на коэффициент ξ , характерный для подземных вод.

Обратная задача по оценке поступления радионуклидов в подземные воды и уточнению миграционных параметров была решена с использованием результатов гидрохимического опробования. Хорошее согласование расчетных и фактических данных получено по большинству скважин режимной сети (рис. 3.32), что говорит об общем соответствии принятых значений параметров условиям миграции радионуклидов в районе хвостохранилища. Некоторые расхождения результатов расчета с данными опробования по скважинам 3р и 5р могут быть связаны с наличием зон повышенной проницаемости в неогеновом горизонте, что невозможно отразить в модели в рамках имеющихся исходных данных

о структуре и свойствах пород. Лучшая степень согласованности достигнута по урану, меньшая – по свинцу и полонию.

Проведенные расчеты показали, что в 2003 г. зона с повышенной радиоактивностью в неогеновом горизонте окаймляла хвостохранилище на 200 – 500 м, и была растянута в северном направлении до 1000 – 1500 м. Возможно, что она уже достигла юго-западной окраины ближайшего населенного пункта, хотя этот результат нуждается в проверке экспериментальными исследованиями. Вместе с тем, участки с заметным увеличением фона (выше 0,2 суммарного ДК_Б) располагались очагами, преимущественно в пределах территории секций. Область распространения ²³⁸U была локализована на территории второй секции и отдельным участком в пределах первой секции. Практически везде, за исключением небольших участков в границах хвостохранилища, содержание радионуклидов в подземных водах не превышало ДК_Б.

Вторым этапом прогноза было определение концентраций радионуклидов в неогеновом горизонте через к 2028 г. (рис. 3.33). По сравнению с 2003 г. продвижение зоны с превышением естественного радиоактивного фона за 25 лет может составить 1 – 2 км, причем наибольшее ее расширение произойдет в северном направлении. Произойдет также расширение отдельных участков с более высоким уровнем радиоактивности, вплоть до населенного пункта, хотя и в концентрациях, не превышающих 0,2 ДК_Б. Следует ожидать расширения зоны повышенного содержания урана, в пределах которой его средняя концентрация составит 0,12 ДК_Б, максимальная – 0,21 ДК_Б. Превышение суммарной ДК_Б по трем радионуклидам возможно лишь на отдельных участках в пределах второй секции, утечки из которой более интенсивны из-за литологического «окна».

Расчеты показали, что уровень радиоактивного загрязнения подземных вод, как в настоящее время, так и в дальнейшем будет определяться главным образом ²¹⁰Pb – элементом со сравнительно небольшим относительно урана периодом полураспада $T_{1/2} = 21,8$ года. Поэтому на длительном отрезке времени (50 – 70 лет и более) этот фактор будет существенно ограничивать распространение радионуклидов в неогеновом горизонте. Несмотря на имеющиеся неопределенности в исходных данных, результаты прогноза свидетельствуют о локализованном влиянии объекта, что обусловлено емкостными свойствами горных пород.

Следует обратить внимание на отсутствие данных опробования к северо-востоку от верхней части первой секции, где самые фильтрационные градиенты достигают наибольших значений. Необходимо восс-

тановить бездействующие или оборудовать как минимум 3-4 новые скважины в неогеновом горизонте севернее скважины 9р, севернее и восточнее скважины 13р. Частота гидрохимического опробования должна быть не реже одного раза в 2 года.

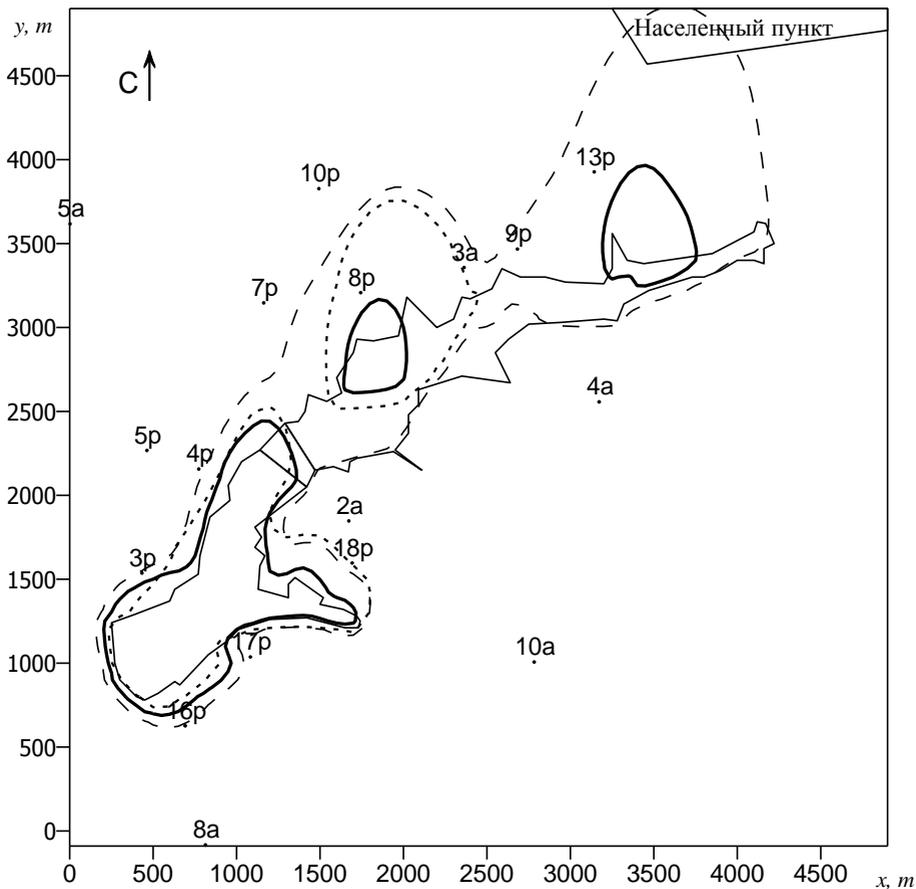


Рис. 3.32. Содержание радионуклидов в воде неогенового горизонта на середину 2003 г. по данным моделирования: контуры зон с превышением: естественного фона (---), уровня 0,2 суммарного ДКБ по ^{238}U , ^{210}Pb и ^{210}Po (—), концентрации урана более 1% его ДКБ(-.-.-).

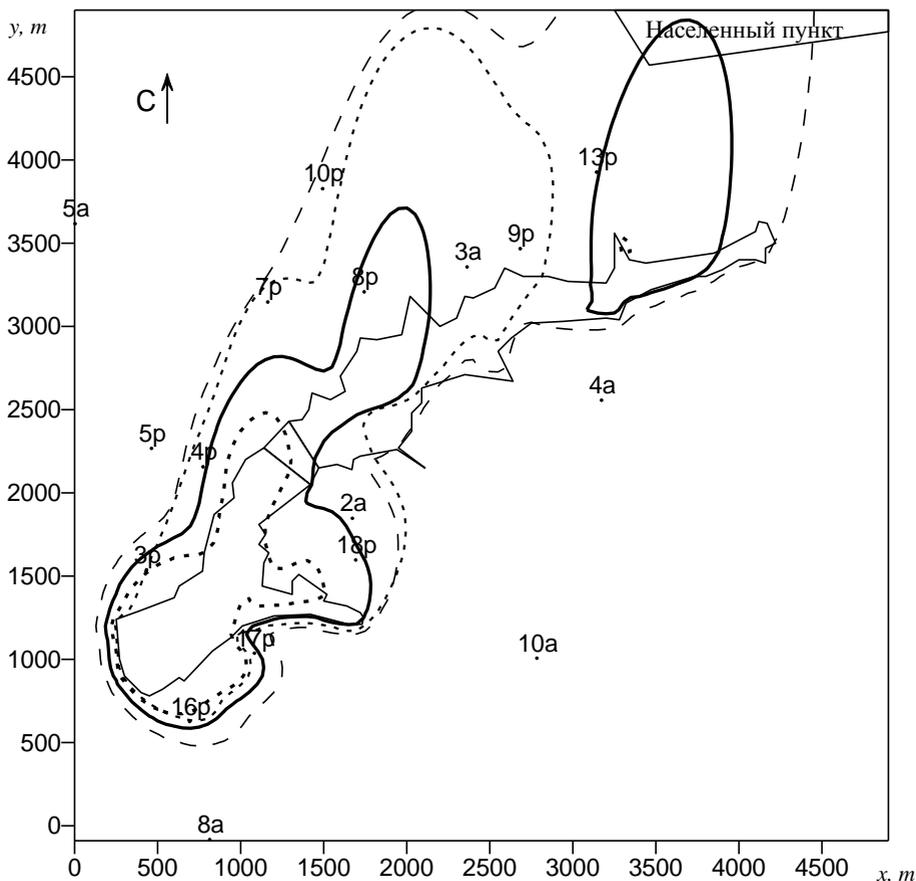


Рис. 3.33. Содержание радионуклидов в воде неогенового горизонта на середину 2028 г. по данным моделирования: контуры зон с превышением: естественного фона (---), уровня 0,2 суммарного ДКБ (—) и 0,5 суммарного ДКБ (— · —) по ^{238}U , ^{210}Pb и ^{210}Po , концентрации урана более 1% его ДКБ(· · · · ·).

Результаты прогноза концентрации токсичных микрокомпонентов (Be, Pb, Cd) [2] и радионуклидов ^{238}U , ^{210}Pb и ^{210}Po свидетельствуют, что существует опасность превышения допустимых концентраций этих веществ в подземных водах в зоне влияния хвостохранилища. Это требует проведения регулярного мониторинга в данном районе.

3.7. Влияние погрешностей исходных параметров на точность прогнозирования

В большинстве случаев при прогнозе миграции на конкретных объектах используются варианты (наборы) фиксированных значений параметров, соответствующих «пессимистическому» или «вероятному» сценарию радиоактивного загрязнения в подземных водах. Такой подход правомерен для долгосрочных и интегральных оценок, даваемых с определенным «запасом». При проведении постоянного мониторинга значительно повышаются требования к точности прогнозов, что делает более важным вопрос о влиянии погрешностей параметров, используемых в моделях, на точность и достоверность выполняемых расчетов. В частности, необходимо определять контуры зависящих от времени зон в области миграции, в которых рассчитываемая концентрация наиболее чувствительна к изменениям исходных данных.

В силу специфики опытно-миграционных работ [35] при прогнозах массопереноса компоненты тензора гидродисперсии и скорости фильтрации обычно рассматриваются как макропараметры, отражающие процессы в масштабе области опробования, достигающей сотен метров. Чтобы оценить влияние пространственной изменчивости этих параметров на концентрацию, можно на основании результатов экспериментов определить диапазоны, ограничивающие значения D и v в области миграции. С другой стороны, область миграции допустимо рассматривать как случайное поле с распределенными параметрами. Тогда для рассчитываемой концентрации определяется среднее значение и дисперсия по формулам (2.125) и (2.126), интеграл в которых с приемлемой для практики точностью удобнее вычислять методом Монте-Карло [68].

Всесторонний анализ влияния погрешностей параметров на результаты моделирования является темой отдельного исследования. Ниже рассмотрен пример количественной оценки изменения рассчитываемой концентрации в результате детерминированных и случайных отклонений параметров D и v . Учет пространственной изменчивости сорбционного параметра n_e частично возможен через параметры $D_x^* = D_x/n_e$, $D_y^* = D_y/n_e$, $v_x^* = v_x/n_e$, $v_y^* = v_y/n_e$ используемые в соотношениях (2.38), (2.43). Коэффициенты гидродисперсии при расчетах определяются как функции скорости фильтрации, которая имеет аналогичную природу стохастической неоднородности.

Пример. Необходимо оценить отклонение рассчитываемой концентрации при погрешности определения скорости фильтрации $\pm 10\%$ в зоне распространения радионуклида от источника непрерывного действия.

Прямоугольный источник поступления ^{90}Sr в водоносный горизонт расположен на большом удалении от границ области фильтрации и первоначально содержит 10^7 Бк. Координаты источника, м: $x_1 = 70$, $y_1 = 60$, $x_2 = 130$, $y_2 = 80$; его интенсивность описывается зависимостью (2.23). Скорость фильтрации, среднее значение которой составляет $0,05$ м/сут, направлена вдоль оси Oy . Значения параметров продольной и поперечной дисперсии приняты равными 5 м и 1 м, так что $D_x = 0,05$ м²/сут, $D_y = 0,25$ м²/сут.

Анализ рис. 3.34 позволяет отметить смещение зоны максимальных концентраций за пределы источника вследствие снижения его интенсивности, вызванной уменьшением запасов радионуклида с течением времени.

Для определения положения зон с наибольшими отклонениями рассчитываемой концентрации при изменении параметров D и v можно использовать отношение

$$\Delta C = \begin{cases} |C(v_0) - C(v_0 + \Delta v)| / C(v_0), & C(v_0) > 0, \\ 0, & C(v_0) = 0; \end{cases} \quad (3.10)$$

где v_0 – среднее значение скорости фильтрации, Δv – ее отклонение. При расчетах, результаты которых представлены на рис. 3.35, изменялся модуль скорости фильтрации и коэффициенты гидродисперсии, а направление скорости оставалось прежним.

С течением времени зона, в которой концентрация определяется с большими отклонениями, смещается по потоку, а их максимальные значения увеличиваются. Сопоставление рис. 3.34 и 3.35 показывает, что наибольшие отклонения ΔC характерны для передней периферийной части зоны распространения вещества ($\Delta C > 3$), а минимальные отклонения ($\Delta C < 0.2$) отмечаются вблизи источника на удалении по потоку до 3 - 5 его характерных размеров. Этот вывод подтверждается анализом изменения концентрации вдоль профилей «I – I» и «II – II» в продольном и поперечном направлениях (рис. 3.36). При отклонении скорости фильтрации на $\pm 10\%$ протяженность зоны распространения ^{90}Sr изменяется не более чем на 10% , средняя и максимальная концентрации – до 20% ; однако в периферийной зоне ΔC достигает $5,0 - 8,0$.

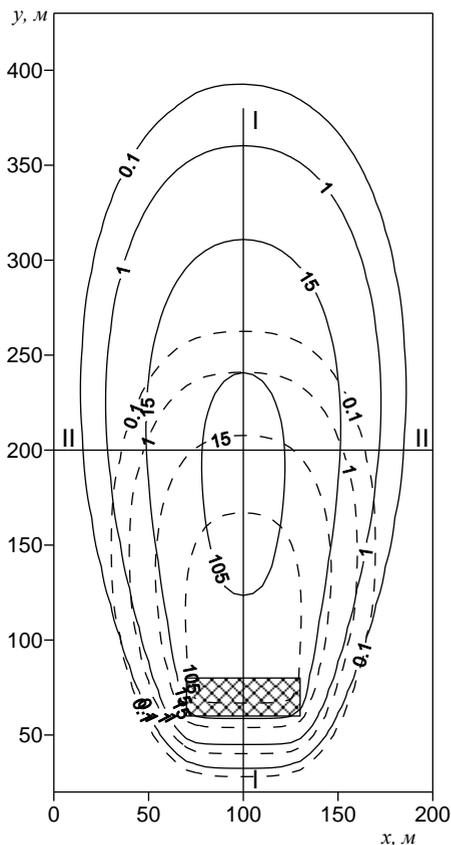


Рис. 3.34. Распределение концентрации ^{90}Sr в моменты времени $t=10$ лет (штриховые кривые) и 20 лет (сплошные кривые).

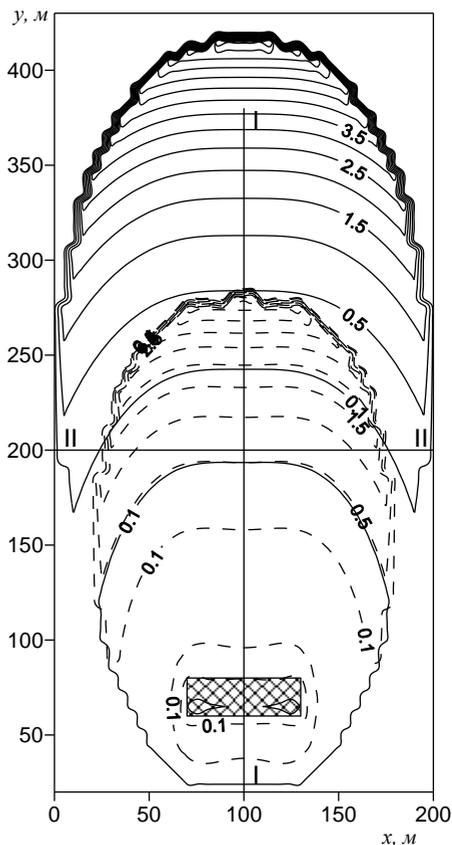
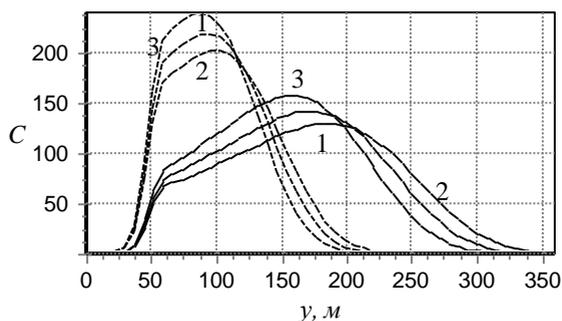


Рис. 3.35. Распределение отклонения ΔC концентрации ^{90}Sr при $+10\%$ отклонении скорости фильтрации и гидродисперсии от средних значений в моменты времени $t=10$ лет (штриховые кривые) и 20 лет (сплошные кривые).

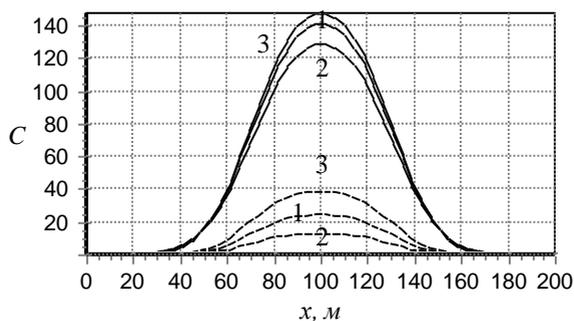
При расчетах с равномерно распределенными параметрами D и v в диапазоне $\pm 10\%$ от их средних значений максимумы среднеквадратичного отклонения концентрации отмечаются в переходной зоне с высокими градиентами C (рис. 3.37). Коэффициент вариации достигает мак-

симула на периферии с двух сторон поперек потока, а на переднем фронте – только в продольном направлении. С течением времени оба эти показателя незначительно увеличиваются.

Применение данного подхода позволяет выделять зоны в области миграции с минимальными и максимальными погрешностями прогнозируемой концентрации, что особенно важно при сопоставлении результатов моделирования с данными мониторинга для калибровки моделей.

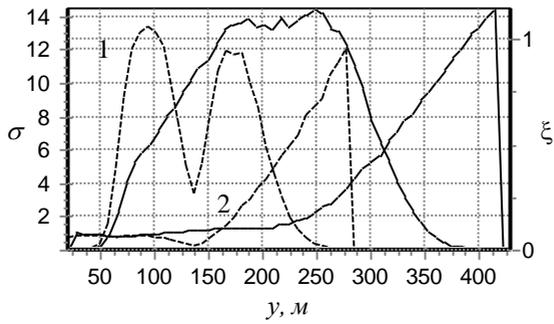


а)

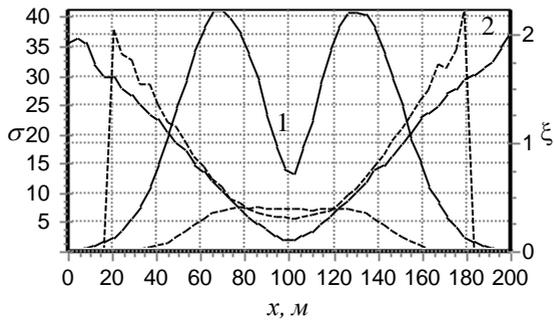


б)

Рис. 3.36. Распределение концентрации ^{90}Sr вдоль профилей «I–I» (а) и «II–II» (б) в моменты времени $t = 10$ лет (штриховые кривые) и 20 лет (сплошные кривые) при погрешности задания скорости фильтрации и гидродисперсии +10% (2) и –10% (3) от среднего значения (1).



а)



б)

Рис. 3.37. Изменение среднеквадратичного отклонения σ концентрации (1) и коэффициента вариации ξ (2) вдоль профилей «I–I» (а) и «II–II» (б) в моменты времени $t = 10$ лет (штриховые кривые) и 20 лет (сплошные кривые) при случайной погрешности скорости фильтрации и гидродисперсии, равномерно распределенной на интервале $\pm 10\%$ их средних значений.

4. МОДЕЛИРОВАНИЕ МАССОПЕРЕНОСА РАДИОНУКЛИДОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

Прогнозирование массопереноса в областях фильтрации сложной структуры с переменными параметрами среды аналитическими методами связано с рядом математических затруднений. Часть их может быть преодолена способами, предложенными в разделе 2.4. Однако в таких случаях на практике обычно используются методы конечных разностей и конечных элементов, которые требуют расчета искомым величин во всех узлах сетки и во все моменты времени, даже если необходимо определять концентрацию только в нескольких контрольных точках в отдельные моменты. Известно, что при сопоставлении результатов расчета с данными мониторинга не обязательно определять концентрацию веществ во всей области массопереноса. Достаточно рассчитать концентрацию только в контрольных точках, представляющих наибольший интерес: в скважинах, колодцах, на участках границ и т. д. Для решения таких задач в большей мере приспособлен метод статистических испытаний (Монте-Карло), который удобно реализовать для поставленной задачи с помощью алгоритма случайных блужданий.

4.1. Разработка алгоритма случайных блужданий для решения уравнения массопереноса

Массоперенос радионуклида в пространственной области Ω с переменными параметрами среды описывается уравнением

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_x C \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_y C \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} - v_z C \right) - \lambda n_e C = n_e \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.1)$$

при следующих граничных и начальных условиях:

$$D \frac{\partial C}{\partial n} = v(C - C_\Gamma), \quad (4.2)$$

$$C(x, y, z, 0) = C_0(x, y, z). \quad (4.3)$$

Принятые здесь обозначения имеют тот же смысл, что и в предыдущих разделах. Предполагается, что $D_x, D_y, D_z, v_x, v_y, v_z$ зависят от переменных x, y, z, t , а n_e – от x, y, z . Зависимости Q и C_0 имеют вид, аналогичный выражениям (2.104), (2.105).

Решение сформулированной краевой задачи можно представить континуальным интегралом по мере Винера [28]. Тогда уравнения (4.1) – (4.3) можно интерпретировать как математическое описание некоторого непрерывного во времени и в пространстве случайного процесса. Для приближенного вычисления континуальный интеграл заменяется конечнократным интегралом по ломаным, которые представляют собой траектории случайного процесса, по ним определяется среднее значение подынтегрального функционала. Важную роль при таком методе решения задачи (4.1) – (4.3) играет способ построения траекторий случайных блужданий «меченой» частицы; некоторые из них для уравнения теплопроводности приведены в [15, 22, 23, 28, 102, 110].

Для построения траекторий блуждания, соответствующих поставленной задаче, вся область Ω покрывается неравномерной прямоугольной сеткой. Узлы сетки нумеруются индексами i, j, k ; причем (x_i, y_j, z_k) – координаты узла сетки с номером (i, j, k) .

Интервал изменения времени $(0, T]$ разбивается на промежутки $[t_s, t_{s+1}]$, где $t_{s+1} = t_s + \Delta t_s$, $s = 0, \dots, M-1$, $t_0 = 0$, $t_M = T$. Аппроксимация дифференциальных операторов проводится по узлам построенной сетки согласно схемам из [64]. Для узла сетки (i, j, k) в момент t_s можно записать

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_x C \right) \approx \\ & \approx \frac{1}{\hbar_{x,i}} \left\{ \left(\frac{d_{x,i}^+}{\Delta x_{i+1}} - \frac{v_{x,i}}{2} \right) C_{i+1,j,k}^s - \left(\frac{d_{x,i}^+}{\Delta x_{i+1}} + \frac{d_{x,i}^-}{\Delta x_i} \right) C_{i,j,k}^s + \left(\frac{d_{x,i}^-}{\Delta x_i} + \frac{v_{x,i}}{2} \right) C_{i-1,j,k}^s \right\}; \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\hbar_{x,i} = \frac{\Delta x_i + \Delta x_{i+1}}{2}, \quad \Delta x_i = x_i - x_{i-1}, \quad d_{x,i}^+ \approx \frac{2D_{x,i}D_{x,i+1}}{D_{x,i} + D_{x,i+1}}, \quad d_{x,i}^- \approx \frac{2D_{x,i}D_{x,i-1}}{D_{x,i} + D_{x,i-1}},$$

$$D_{x,i} = D_x(x_i, y_j, z_k), \quad v_{x,i} = v_x(x_i, y_j, z_k), \quad C_{i,j,k}^s = C(x_i, y_j, z_k, t_s).$$

При замене первой производной используется центральная разностная схема с порядком аппроксимации на всей сетке $O(\hbar_x^2)$, где $\hbar_x = \max_i \{\hbar_{x,i}\}$ [64]. Дифференциальные операторы, содержащие производные по другим координатам, аппроксимируются аналогично.

Среди возможных способов аппроксимации уравнения (4.1), представленных, например в [49, 64], для алгоритма случайных блужданий

наиболее приемлемы явная и неявная схемы. Порядок аппроксимации при их использовании составит $O(\hbar_x^2 + \hbar_y^2 + \hbar_z^2 + \tau)$, где $\hbar_y = \max_j \{\hbar_{y,j}\}$, $\hbar_z = \max_k \{\hbar_{z,k}\}$, $\tau = \max_s \{\Delta t_s\}$. Тогда разностный аналог (4.1) в момент t_s для узла (i, j, k) в случае явной схемы имеет вид:

$$C_{i,j,k}^{s+1} = p_{i+1}^s C_{i+1,j,k}^s + p_{i-1}^s C_{i-1,j,k}^s + p_{j+1}^s C_{i,j+1,k}^s + p_{j-1}^s C_{i,j-1,k}^s + p_{k+1}^s C_{i,j,k+1}^s + p_{k-1}^s C_{i,j,k-1}^s + p_i^s C_{i,j,k}^s + P_{rd}^s C_{rd}^s + Q_{i,j,k}^s, \quad (4.5)$$

где

$$p_{i+1}^s = \frac{\Delta t_s}{n_{i,j,k} \hbar_{x,i}} \left(\frac{d_{x,i}^+}{\Delta x_{i+1}} - \frac{v_{x,i}}{2} \right), \quad p_{i-1}^s = \frac{\Delta t_s}{n_{i,j,k} \hbar_{x,i}} \left(\frac{d_{x,i}^-}{\Delta x_i} + \frac{v_{x,i}}{2} \right),$$

$$p_{j+1}^s = \frac{\Delta t_s}{n_{i,j,k} \hbar_{y,j}} \left(\frac{d_{y,j}^+}{\Delta y_{j+1}} - \frac{v_{y,j}}{2} \right), \quad p_{j-1}^s = \frac{\Delta t_s}{n_{i,j,k} \hbar_{y,j}} \left(\frac{d_{y,j}^-}{\Delta y_j} + \frac{v_{y,j}}{2} \right),$$

$$p_{k+1}^s = \frac{\Delta t_s}{n_{i,j,k} \hbar_{z,k}} \left(\frac{d_{z,k}^+}{\Delta z_{k+1}} - \frac{v_{z,k}}{2} \right), \quad p_{k-1}^s = \frac{\Delta t_s}{n_{i,j,k} \hbar_{z,k}} \left(\frac{d_{z,k}^-}{\Delta z_k} + \frac{v_{z,k}}{2} \right),$$

$$p_{i,j,k}^s = 1 - \frac{\Delta t_s}{n_{i,j,k}} A, \quad p_{rd}^s = \lambda \Delta t_s, \quad C_{rd}^s = 0, \quad Q_{i,j,k}^s = \frac{\Delta t_s}{n_{i,j,k}} Q(x_i, y_j, z_k, t_{s+1/2}),$$

$$A = \frac{1}{\hbar_{x,i}} \left(\frac{d_{x,i}^+}{\Delta x_{i+1}} + \frac{d_{x,i}^-}{\Delta x_i} \right) + \frac{1}{\hbar_{y,j}} \left(\frac{d_{y,j}^+}{\Delta y_{j+1}} + \frac{d_{y,j}^-}{\Delta y_j} \right) + \frac{1}{\hbar_{z,k}} \left(\frac{d_{z,k}^+}{\Delta z_{k+1}} + \frac{d_{z,k}^-}{\Delta z_k} \right) + \lambda.$$

Для неявной схемы в момент t_s в узле (i, j, k) разностное уравнение записывается в виде:

$$C_{i,j,k}^s = \tilde{p}_{i+1}^s C_{i+1,j,k}^s + \tilde{p}_{i-1}^s C_{i-1,j,k}^s + \tilde{p}_{j+1}^s C_{i,j+1,k}^s + \tilde{p}_{j-1}^s C_{i,j-1,k}^s + \tilde{p}_{k+1}^s C_{i,j,k+1}^s + \tilde{p}_{k-1}^s C_{i,j,k-1}^s + \tilde{p}_i^s C_{i,j,k}^{s-1} + \tilde{p}_{rd}^s C_{rd}^s + \tilde{Q}_{i,j,k}^s; \quad (4.6)$$

$$\tilde{p}_{i\pm 1}^s = \frac{1}{H} p_{i\pm 1}^s, \quad \tilde{p}_{j\pm 1}^s = \frac{1}{H} p_{j\pm 1}^s, \quad \tilde{p}_{k\pm 1}^s = \frac{1}{H} p_{k\pm 1}^s, \quad \tilde{p}_{i,j,k}^s = \frac{1}{H},$$

$$\tilde{p}_{rd}^s = \frac{1}{H} p_{rd}^s, \quad \tilde{Q}_{i,j,k}^s = \frac{1}{H} Q_{i,j,k}^s, \quad H = 1 + \frac{\Delta t_s}{n_{i,j,k}} A.$$

Аппроксимация условия (4.2) рассматривается далее для случая, когда вектор нормали к границе Γ в узле (i, j, k) перпендикулярен плоскости yOz . Тогда условие (4.2) принимает вид

$$D_x \frac{\partial C}{\partial x} = v_x (C - C_\Gamma). \quad (4.7)$$

Пусть (x_{i+1}, y_j, z_k) – координаты внутреннего узла сеточной области, а (x_{i-1}, y_j, z_k) – координаты законтурного фиктивного узла, расположенного вне области Ω . Разностный аналог (4.7) при использовании центральной разностной схемы с порядком аппроксимации $O(\Delta x_{i+1}^2)$ записывается в виде

$$C_{i-1,j,k}^s = C_{i+1,j,k}^s + \frac{2v_{x,i}\Delta x_{i+1}}{D_{x,i}} (C_{i,j,k}^s - C_{\Gamma,i,j,k}^s). \quad (4.8)$$

Подставляя (4.8) в (4.5), получим:

$$C_{i,j,k}^{s+1} = p_{i+1}^s C_{i+1,j,k}^s + p_{\Gamma,i-1}^s C_{\Gamma,i,j,k}^s + p_{j+1}^s C_{i,j+1,k}^s + p_{j-1}^s C_{i,j-1,k}^s + p_{k+1}^s C_{i,j,k+1}^s + p_{k-1}^s C_{i,j,k-1}^s + p_i^s C_{i,j,k}^s + p_{rd}^s C_{rd}^s + Q_{i,j,k}^s, \quad (4.9)$$

где

$$p_{i+1}^s = \frac{2\Delta t_s D_{x,i}}{n_{i,j,k} \Delta x_{i+1}^2}, \quad p_{\Gamma,i-1}^s = \frac{2\Delta t_s v_{x,i}}{n_{i,j,k} D_{x,i}} \left(\frac{D_{x,i}}{\Delta x_{i+1}} + \frac{v_{x,i}}{2} \right),$$

$$p_{i,j,k}^s = 1 - \frac{\Delta t_s}{n_{i,i,k}} \left\{ \left(\frac{2D_{x,i}}{\Delta x_{i+1}^2} + \frac{2v_{x,i}}{D_{x,i}} \left(\frac{2D_{x,i}}{\Delta x_{i+1}} + \frac{2v_{x,i}}{2} \right) \right) + \frac{1}{\hbar_{y,j}} \left(\frac{d_{y,j}^+}{\Delta y_{j+1}} + \frac{d_{y,j}^-}{\Delta y_j} \right) + \frac{1}{\hbar_{z,k}} \left(\frac{d_{z,k}^+}{\Delta z_{k+1}} + \frac{d_{z,k}^-}{\Delta z_k} \right) + \lambda \right\},$$

остальные обозначения прежние.

Таким же способом для граничного условия (4.7) модифицируется разностное уравнение (4.6), полученное по неявной схеме. Аналогич-

ный подход применяется и в случае, когда узел $(i-1, j, k)$ – внутренний, а узел с индексами $(i+1, j, k)$ находится вне области Ω . Эта техника используется для других пространственных координат без принципиальных изменений.

Начальные условия аппроксимируются в виде

$$C_{i,j,k}^0 = C_0(x_i, y_j, z_k). \quad (4.10)$$

Взятые в совокупности уравнения (4.4) – (4.10) представляют собой системы линейных алгебраических уравнений относительно неизвестных $C_{i,j,k}^s$. В случае явной схемы при сквозной нумерации узлов от 1 до n можно записать

$$C^{(s+1)} = P^{(s)}C^{(s)} + Q^{(s)}, \quad s=0, \dots, M-1, \quad (4.11)$$

где $C^{(s)}$ – вектор значений концентрации в узлах сетки в момент t_s , $P^{(s)}$ – матрица коэффициентов сеточных уравнений, определяемых в тот же момент времени; $Q^{(s)}$ – вектор свободных членов, определяемый по значениям Q в узлах сетки при $t=t_s$. Каждая r -я строчка матрицы $P^{(s)}$, ($r=1, \dots, n$) составлена следующим образом: если узлы с номерами r и m являются соседними, то элемент матрицы $p_{rm}^{(s)} > 0$, иначе $p_{rm}^{(s)} = 0$. Значения $p_{rm}^{(s)}$ определяются в соответствии с (4.5) или (4.9).

В случае неявной схемы вычисляется последовательность коэффициентов систем уравнений

$$\tilde{P}^{(s)}C^{(s+1)} = \tilde{C}^{(s)} + \tilde{Q}^{(s)}, \quad s=0, \dots, M-1; \quad (4.12)$$

где $\tilde{P}^{(s)}$, $\tilde{C}^{(s)}$, $\tilde{Q}^{(s)}$ имеют тот же смысл, что и $P^{(s)}$, $C^{(s)}$, $Q^{(s)}$, но определяются в соответствии с (4.6). Решение этих систем позволит последовательно вычислить значения концентрации в узлах сетки как элементы матриц $\tilde{C}^{(s+1)}$.

При большом числе n для пространственных областей порядок матриц $P^{(s)}$ и $\tilde{P}^{(s)}$ сильно возрастает. В таком случае решение систем (4.12) методами линейной алгебры связано со значительным увеличением требуемых вычислительных ресурсов. Ограничения на выбор шага по времени в явной схеме приводят к тем же результатам при решении систем уравнений (4.11). Метод Монте-Карло позволяет преодо-

леть указанные трудности при необходимости определения нескольких значений $C^{(s)}$ только в интересующих узлах сетки. Решение систем (4.11) и (4.12), как показано в [15, 22, 68], оказывается эквивалентным моделированию цепи Маркова с конечным числом состояний, рассматриваемых в дискретные моменты времени.

Цепь Маркова для решения поставленной задачи строится таким образом, чтобы реализовывалась возможность перехода блуждающей частицы в поглощающее состояние. Переход в это состояние может быть обусловлен фактором радиоактивного распада, выходом частицы на границу области, где возможно поглощение, истечением времени блуждания. В качестве матриц переходных вероятностей используются расширенные матрицы, полученные из $P^{(s)}$ и $\tilde{P}^{(s)}$ путем добавления к ним $(n+1)$ -й строки, состоящей из n подряд стоящих нулей и единицы, и $(n+1)$ -го столбца, r -й элемент которого равен вероятности перехода частицы из r -го узла в поглощающее состояние в момент t_s .

Элементы левого верхнего минора n -го порядка этих матриц $p_{rm}^{(s)}$ и $\tilde{p}_{rm}^{(s)}$ интерпретируются как вероятности перехода блуждающей частицы из r -го в m -й узел сеточной области в момент t_s . Величины $p_{rd}^{(s)}$ и $\tilde{p}_{rd}^{(s)}$ из (4.5), (4.6) и (4.9) имеют смысл вероятности «гибели» частицы в момент t_s в рассматриваемом узле вследствие радиоактивного распада; $p_{\Gamma,i+1}^{(s)}$ из (4.9) – вероятности поглощения частицы на границе области Ω . Указанные вероятности выражаются через параметры свойств пород водоносных пластов и характеризуют направленность массопереноса.

Для элементов расширенной стохастической матрицы должны выполняться соотношения [22]:

$$\sum_{m=1}^n p_{r,m}^{(s)} = 1 - p_{r,n+1}^{(s)}; \quad r=0, \dots, n+1; \quad (4.13)$$

$$p_{r,m}^{(s)} \geq 0; \quad m=0, \dots, n+1; \quad r=0, \dots, n+1. \quad (4.14)$$

Условие (4.13) выполняется автоматически. Для удовлетворения условиям (4.14) необходимо потребовать, чтобы в (4.5) и (4.6) шаги сетки по пространственным координатам выбирались исходя из неравенств:

$$\Delta x_{i+1} \leq \frac{2d_{x,i}^+}{|v_{x,i}|}, \Delta x_i \leq \frac{2d_{x,i}^-}{|v_{x,i}|}, \Delta y_{j+1} \leq \frac{2d_{y,j}^+}{|v_{y,j}|},$$

$$\Delta y_{j-1} \leq \frac{2d_{y,j}^-}{|v_{y,j}|}, \Delta z_{k+1} \leq \frac{2d_{z,k}^+}{|v_{z,k}|}, \Delta z_{k-1} \leq \frac{2d_{z,k}^-}{|v_{z,k}|}. \quad (4.15)$$

Кроме того, для явной схемы (4.5) дополнительно необходимо потребовать, чтобы шаг по времени Δt_s удовлетворял неравенству

$$\Delta t_s \leq n_{i,j,k} / A. \quad (4.16)$$

Для граничного узла (i, j, k) знаменатель в (4.16) изменяется в соответствии с соотношениями (4.9), то есть на границе третьего рода шаг по времени в явной схеме выбирается с модифицированным ограничением сверху. Таким образом, уравнения (4.5), (4.6), (4.9), (4.10) совместно с неравенствами (4.15) и (4.16) определяют марковский процесс с конечным числом состояний. Решение краевой задачи массопереноса (4.1) – (4.3) в любой точке области Ω находится путем моделирования соответствующих марковских цепей, начинающихся в этой же точке в интересующий момент времени.

Вычислительный процесс представляет собой серию независимых случайных блужданий «меченой» частицы по узлам сеточной области. Каждое из этих блужданий с порядковым номером l в серии статистических испытаний начинается в фиксированной точке (x_0, y_0, z_0) . Движущейся частице приписывается вес W_l , который перед началом блуждания приравняется нулю, и текущее время t_s , равное T .

На каждом этапе блуждания определяется значение случайной величины ξ , равномерно распределенной на $[0, 1]$. В зависимости от текущего положения частицы отрезок $[0, 1]$ разбивается на интервалы с длинами, равными $p_{r,m}^{(s)}$ – элементами r -й строки матрицы перехода, которые представляют собой коэффициенты уравнений (4.5) или (4.6). В силу выбора величин $p_{r,m}^{(s)}$ по (4.13) и (4.14) суммарная длина этих интервалов в точности равна единице. При попадании значения ξ в один из таких интервалов осуществляется переход частицы в новое состояние (рис. 4.1), одновременно t_s уменьшается на Δt_s . Сохранение текущего геометрического положения частицы на другом временном

слое возможно при условии $p_{i,j,k}^{(s)} > 0$. Переход в новое состояние сопровождается изменением веса W_l на величину $Q_{i,j,k}^{(s)}$.

Поскольку время блуждания ограничено, то с вероятностью, равной единице, каждое блуждание завершается через конечное число шагов. В ограниченных областях и для распадающегося вещества траектория движения частицы может оборваться раньше, чем она достигнет начального момента времени. Обрыв марковской цепи в узле (i, j, k) сеточной области возможен в таких случаях: 1) достижении начального момента времени, тогда W_l увеличивается на величину $C_{i,j,k}^0$, 2) поглощению на границе Γ , при этом W_l увеличивается на $C_{\Gamma,i,j,k}^s$, 3) «гибели» частицы вследствие распада, тогда W_l не изменяется. Граница третьего рода представляет собой частично отражающий экран, поэтому частица, попавшая в граничный узел, может либо поглотиться (случай «2»), либо вернуться внутрь области; она может также остаться в том же узле при $p_{i,j,k}^{(s)} > 0$, либо двигаться вдоль границы в направлении осей координат, параллельных граничной поверхности.

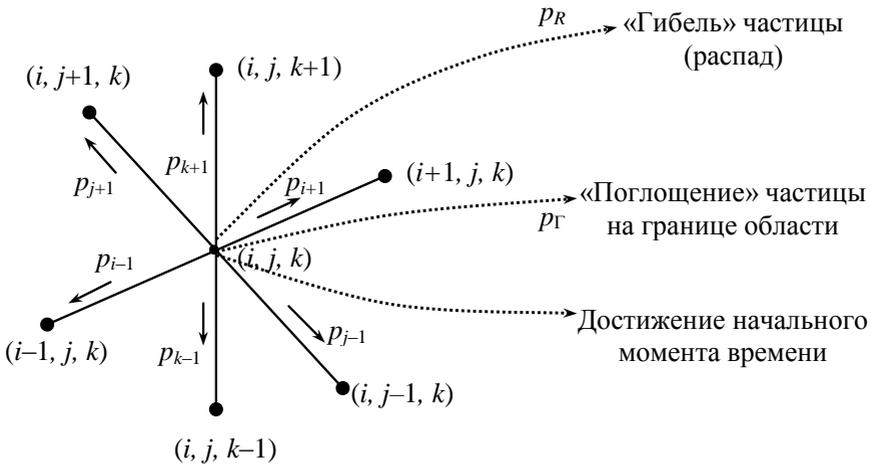


Рис. 4.1. Направления переходов «меченой» частицы из узла сетки (i, j, k) .

Пусть в ходе блуждания частица описывает траектории, проходящие через узлы с номерами: i_0 (начальный узел), i_1, \dots, i_{s-1}, i_s (i_s – узел обрыва траектории). Вероятность реализации данной траектории равна произведению $p_{i_0, i_1} \dots p_{i_{s-1}, i_s} p_{i_s, n+1}$, где $p_{i_k, i_{k+1}}$ – вероятность перехода из i_k -го в i_{k+1} -й узел, $p_{i_s, n+1}$ – вероятность перехода в поглощающее состояние из узла i_s . В ходе блуждания накопленный частицей вес $q^{(s)}$ составит

$$q^{(s)} = \sum_{j=i_0}^{i_k} q_{j, j+1}, \quad (4.17)$$

где $q_{j, j+1}$ – увеличение веса частицы при переходе из j -го в $(j+1)$ -й узел, а i_{s+1} можно рассматривать как фиктивный узел, соответствующий поглощающему состоянию. Математическое ожидание MW суммы накопленных в ходе блуждания весов W_l , определяемое на траектории цепи Маркова, вычисляется по формуле

$$MW = \sum_{s=1}^{M-1} \sum_{i_0=1}^n \dots \sum_{i_s=1}^n q^{(s)} p_{i_0, i_1} \dots p_{i_{s-1}, i_s} p_{i_s, n+1}. \quad (4.18)$$

Поскольку в силу построения $p_{r, m}^{(s)}$ являются коэффициентами сеточных уравнений, то MW представляет собой решение конечно-разностных задач (4.11), (4.12) в узле i_0 сеточной области в момент времени T [9, 22, 28]. Величина \bar{W} , определяемая как среднее арифметическое весов, накопленных в ходе N блужданий или по результатам N статистических испытаний, является несмещенной и состоятельной оценкой величины MW [22, 68]:

$$MW = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N W_l. \quad (4.19)$$

Для ограниченных функций Q, C_0, C_Γ дисперсия \bar{W} всегда конечна:

$$D\bar{W} \leq M\bar{W}^2 \leq \left\{ T \max_{\Omega \times (0, T]} \{Q\} + \max_{\Gamma \times (0, T]} \left\{ \max_{\Omega} \{C_\Gamma\}, \max \{C_0\} \right\} \right\}^2.$$

Некоторые общие оценки дисперсии для различных цепей Маркова приведены в [22, 23].

Погрешность метода в предположении о конечности дисперсии может быть оценена с помощью центральной предельной теоремы [9, 68]:

$$P\left\{\bar{W} - C_s \mid < x_\beta \sqrt{DW/N}\right\} \approx \beta. \quad (4.20)$$

где $\beta = \Phi(x_\beta)$, Φ – интеграл вероятностей, $C_s = M W$, x_β – параметр, определяющий доверительный интервал. Сходимость метода носит статистический характер, а вероятность неравенства

$$\left|\bar{W} - C_s\right| < x_\beta \sqrt{DW/N}, \quad (4.21)$$

с помощью которого оценивается абсолютная погрешность, приближенно равна β . Таким образом, погрешность убывает пропорционально $N^{-1/2}$. Дисперсия $D W$ может быть рассчитана в ходе вычислений и использована в (4.21) для оценивания сходимости метода.

Кроме числа испытаний, на точность результатов, получаемых методом Монте-Карло, влияет выбор схемы конечно-разностной аппроксимации для построения цепи Маркова. Основное отличие между марковскими цепями, построенными на основе явной и неявной схем, состоит в следующем. В случае явной схемы (4.5) всегда осуществляется либо переход частицы на предыдущий временной слой, либо с вероятностью прекращения блуждания переход в поглощающее состояние. В случае неявной схемы (4.6) переход на предыдущий временной слой – лишь один из возможных вариантов изменения положения частицы в пространстве и во времени. Поэтому существует ненулевая вероятность того, что произойдет несколько переходов частицы в пространстве на одном и том же временном слое. Такая марковская цепь в среднем оказывается более длинной, чем цепь, построенная на основе явной схемы, то есть в случае неявной схемы для эквивалентного промежутка времени требуется большее количество временных шагов.

Разработанный алгоритм метода Монте-Карло обладает рядом преимуществ при моделировании массопереноса радионуклидов в пространственных областях фильтрации сложной структуры в условиях неопределенности параметров переноса. В отличие от других численных методов, данный алгоритм позволяет независимо моделировать массоперенос в подземных водах в отдельных контрольных точках области без расчета во всех узлах сетки.

4.2. Исследование точности алгоритма моделирования

Для вычислительной реализации метода Монте-Карло использовалась явная схема (4.5) с ограничениями на выбор шагов (4.15) и (4.16). Кроме схемы аппроксимации на точность вычислений результатов влияют качество вырабатываемых ЭВМ псевдослучайных чисел, способ аппроксимации области фильтрации, размер шагов сетки, число испытаний и миграционные параметры.

Статистическая проверка вырабатываемых на компьютере псевдослучайных чисел по критерию χ^2 с уровнем значимости 0,05 при 4, 6 и 9 степенях свободы и объемом выборки 10^4 – 10^5 показала возможность использования получаемых последовательностей в качестве независимых случайных величин, равномерно распределенных на интервале $[0, 1]$, при моделировании цепей Маркова.

В общем случае параметры массопереноса изменяются в пространстве и во времени, поэтому переходные вероятности необходимо заново вычислять в каждом узле сеточной области. Однако реальным условиям миграции и уровню детальности исходных данных хорошо соответствует схематизация трехмерной области фильтрации, согласно которой параметры процесса кусочно-постоянны в пространстве и во времени. Использование такой схемы позволяет значительно упростить процедуру вычислений: в отличие от других численных методов отпадает необходимость хранить информацию о значениях вычисляемых величин во всех узлах сетки. Кроме того, оказывается возможным обойтись без хранения данных о координатах узлов и значениях параметров в них.

Разработанная программа, реализующая алгоритм случайного блуждания, использует информацию: а) о границах зон в области фильтрации и диапазонах времени, в пределах которых значения параметров остаются постоянными; б) о положении блуждающей частицы в пространстве и во времени и накопленном ею весе в любой момент времени. Поскольку для подобластей с постоянными параметрами значения переходных вероятностей не изменяются, то они вычисляются до начала блужданий, что позволяет значительно сократить объем вычислений.

Шаги пространственно-временной сетки выбираются автоматически в соответствии с (4.15) и (4.16). Кроме того, предусмотрена возможность их ограничения таким образом, чтобы они не превышали задаваемых пользователем значений. Для более точной аппроксимации внутренних источников в соответствии с интегро-интерполяционным

методом [64] производится дополнительная корректировка шагов сетки. Она состоит в том, что любые два соседних узла, один из которых находится в источнике выделения вещества, другой – вне его, располагаются так, чтобы расстояние между ними (шаг сетки) делилось приблизительно пополам границей источника.

Требования точности, предъявляемые к методу статистических испытаний для интегрирования уравнения массопереноса (4.1), следует увязывать со спецификой прогноза и контроля миграции радионуклидов в подземных водах. Как отмечается в [7, 35, 77, 78], определение параметров переноса в подземных водах связано с неизбежными, часто весьма значительными погрешностями. В таких условиях требования к точности расчетов не могут быть очень высокими, поэтому относительная погрешность до 5% может считаться хорошей, до 10% – удовлетворительной с точки зрения геомиграционных прогнозов.

Отличительная особенность метода Монте-Карло состоит в том, что он дает возможность оценивать точность полученных результатов в ходе расчетов. Если точное значение концентрации C_a известно, причем $C_a > 0$ в соответствии с физическим смыслом задачи, то оказывается возможным по неравенству (4.21) определить с заданной вероятностью β верхнюю границу относительной погрешности ε

$$\varepsilon = \frac{|\bar{W} - C_a|}{C_a} < \frac{x_\beta}{C_a} \sqrt{DW/N} = \varepsilon_N. \quad (4.22)$$

Полученное после N испытаний значение ε_N , в котором вместо D и W подставляется ее оценка, допустимо использовать как верхнюю границу относительной погрешности. Например, если $\varepsilon_N \leq 0,05$ при $x_\beta = 1,96$, то с вероятностью $\beta = 0,95$ можно утверждать, что относительная погрешность полученного результата не превышает 0,05. В приведенных рассуждениях не учитывалась погрешность конечно-разностной аппроксимации, для уменьшения которой применимы известные способы [49, 64, 70].

Тестирование разработанного алгоритма значительно облегчается наличием точных решений массопереноса, полученных в главе 3 для некоторых пространственных задач. Поэтому проверка точности результатов, полученных методом Монте-Карло, проводилась на примере краевой задачи, для которой имеется аналитическое решение. В связи с большим многообразием факторов процесса для тестирования был выбран пример с типичными значениями миграционных параметров. Ос-

новное внимание при сопоставлении расчетов уделялось влиянию на точность алгоритма коэффициентов уравнения (4.1) и параметров вычислительного процесса.

Рассматривается перенос ^{90}Sr в неограниченном водоносном горизонте большой мощности ($-\infty < x < +\infty$, $-\infty < y < +\infty$, $z \geq 0$) при непрерывном выделении радионуклида из объемного источника – параллелепипеда с координатами, м: $x_1 = 50$, $x_2 = 65$, $y_1 = 30$, $y_2 = 40$, $z_1 = 2$, $z_2 = 7$. Активность источника убывает во времени согласно (2.22), а ее максимальное значение при $t = 0$ составляет $q_0 = 1$ КБк/(м³·сут). Параметр эффективной пористости $n_e = 4,0$, фоновая концентрация C_e принята равной нулю. Второй вариант значений параметров переноса (табл. 4.1) характеризуется более высокими значениями скоростей горизонтального переноса.

Результаты, полученные методом Монте-Карло, сравнивались с аналитическим решением, которое определяется формулами (2.106), (2.110), (2.40) и (2.100). Сопоставление производилось в различных контрольных точках, которые выбирались по одной из зоны высоких концентраций (более 80% максимального значения), в переходной зоне (20 – 80% максимума), в зоне малых значений (менее 20% от максимума), на границе области (кровле водоносного горизонта $z = 0$). Значения концентрации определялись при различных шагах сетки, миграционных параметрах (варианты А и Б) и в различные моменты времени. Шаги сетки по пространственным координатам удовлетворяют условию (4.15), а шаг по времени выбран максимально возможным согласно (4.16).

Во избежание случайных ошибок при оценке точности, возможных из-за специфики метода, в каждой контрольной точке проводилась серия из $N_0=10$ независимых определений концентрации при N случайных блужданиях. Пусть ε_5^- , ε_{10}^- , ε_{20}^- – соответственно нижняя (левая) часть 5, 10 и 20%-й окрестности точного значения C_a . По результатам каждой серии испытаний были определены числа: N_5^- – количество серий из N_0 , результаты которых попали в ε_5^- ; N_{10}^- – количество серий из N_0 , результаты которых попали в ε_{10}^- , но не попали в ε_5^- ; N_{20}^- – количество серий из N_0 , результаты которых попали в ε_{20}^- , но не попали в ε_{10}^- . Аналогичным образом были определены числа N_5^+ , N_{10}^+ и N_{20}^+ . На рис. 4.2 – 4.5 показаны распределения количества результатов n , по-

павших в одну из перечисленных окрестностей точного значения C_a . Для столбцов гистограмм приняты следующие обозначения (табл. 4.2).

Подавляющее большинство полученных результатов (89.4%) попали в 10%-ю окрестность точных значений, а почти две трети (65.2%) – в 5%-ю окрестность. Результаты расчетов методом Монте-Карло по отношению к точным значениям распределились почти симметрично: 45% из них меньше, 55% – больше этих значений.

Дробление шага сетки приводит к заметному улучшению результатов и их сходимости к точным значениям. При уменьшении шага сетки вдвое доля результатов, попавших в 5%-ю окрестность, увеличилась с 57 до 73%. Аналогичный эффект дало увеличение числа испытаний в 10 раз: тот же показатель возрос с 56 до 74%. Все полученные результаты получены с относительной погрешностью до 20%. Из общего количества «плохих» результатов, не попавших в 10%-ю окрестность, 82% получены при малом числе испытаний $N=500$ и только 18% – при $N=5000$. Увеличение числа испытаний и дробление шага сетки дают наибольший эффект при определении концентрации в контрольных точках в зоне малых значений и на границе области.

Таблица 4.1

Варианты значений параметров при оценке точности численного алгоритма

Вариант	D_x м ² /сут	D_y м ² /сут	D_z м ² /сут	v_x м/сут	v_y м/сут	v_z м/сут
А	0,2	0,01	0,05	0,04	0,002	0,005
Б	0,2	0,01	0,05	0,2	0,01	0,005

Таблица 4.2

Обозначения столбцов гистограмм на рис. 4.2 – 4.5.

	N	Δx , м		N	Δx , м
	500	1,0		500	0,5
	N	Δx , м		N	Δx , м
	5000	1,0		5000	0,5

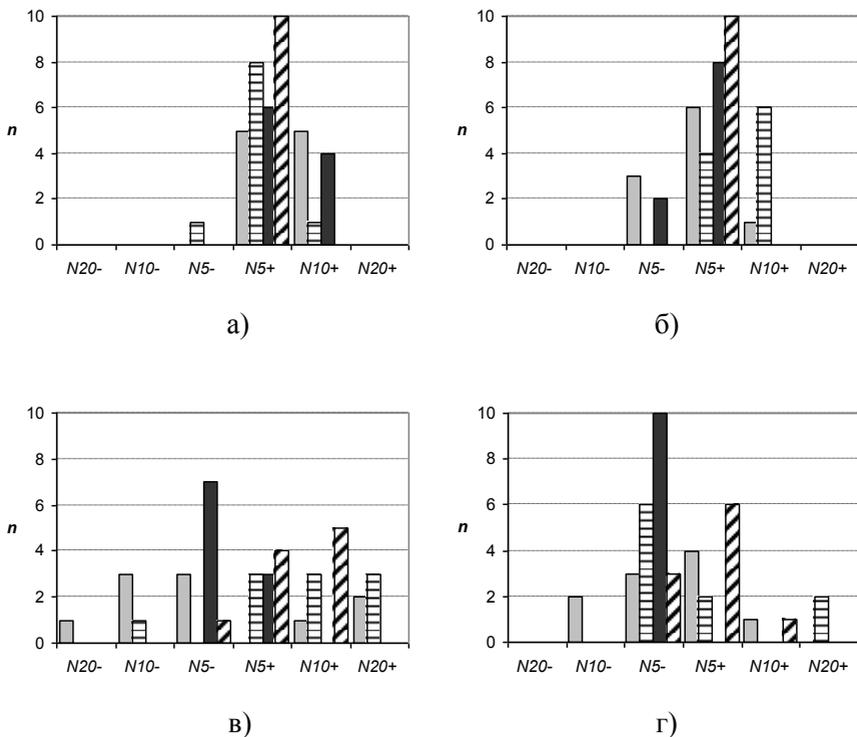


Рис. 4.2. Распределение значений концентрации, рассчитанных методом Монте-Карло, в окрестности значения C_a для варианта А в момент времени 500 сут.

	Зона	Координаты, (x, y, z), м	Значение C_a	Погрешность ϵ_N^*
а)	высоких концентраций	65, 35, 5	70,57	0,10 / 0,03
б)	переходная	68, 35, 4	35,58	0,12 / 0,04
в)	периферийная	73, 38, 6	10,55	0,19 / 0,06
г)	граница области	60, 36, 0	26,01	0,14 / 0,04

* числитель – при 500 испытаниях, знаменатель – при 5000 испытаниях, ($\chi_\beta = 1,96, \beta = 0,95$).

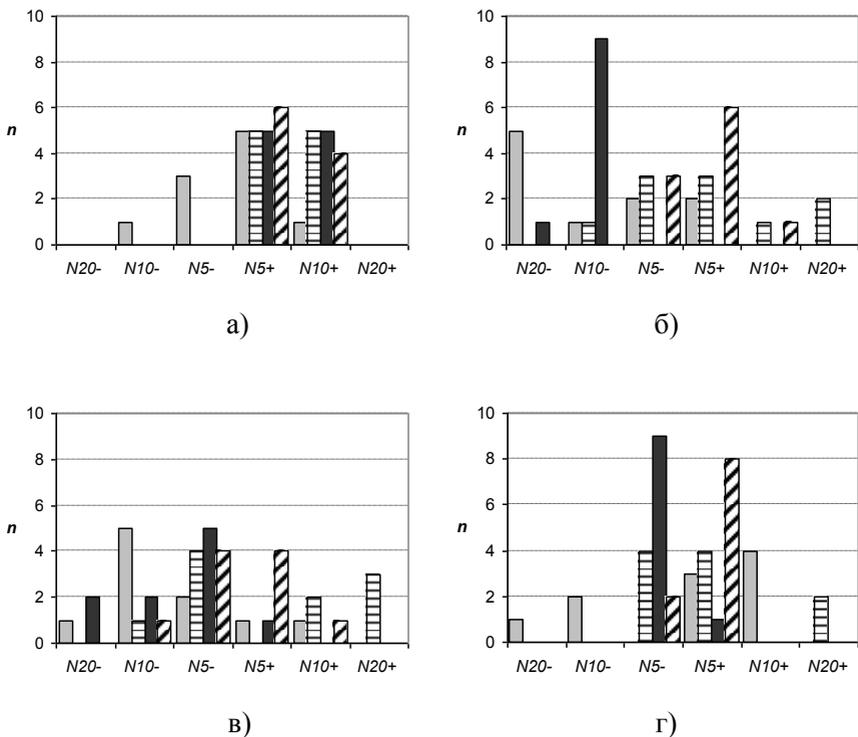


Рис. 4.3. Распределение значений концентрации, рассчитанных методом Монте-Карло, в окрестности значения C_a для варианта А в момент времени 3000 сут.

	Зона	Координаты, (x, y, z), м	Значение C_a	Погрешность ϵ_N^*
а)	высоких концентраций	62, 36, 5	121,15	0,11 / 0,04
б)	переходная	70, 40, 5	53,12	0,16 / 0,05
в)	периферийная	46, 35, 4	14,78	0,25 / 0,09
г)	граница области	70, 37, 0	64,42	0,14 / 0,04

* числитель – при 500 испытаниях, знаменатель – при 5000 испытаниях

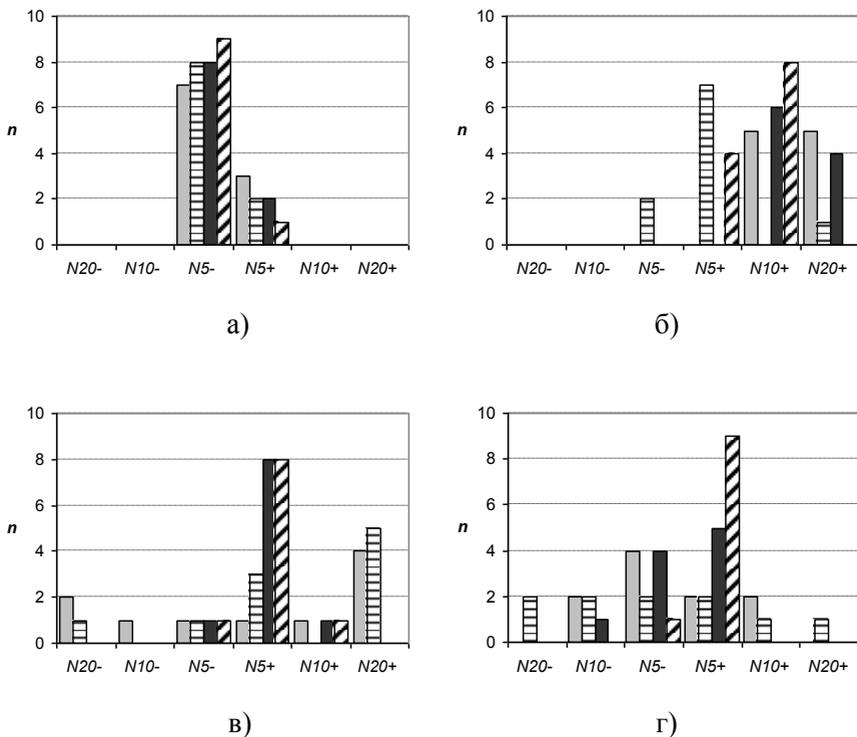


Рис. 4.4. Распределение значений концентрации, рассчитанных методом Монте-Карло, в окрестности значения C_a для варианта Б в момент времени 500 сут.

	Зона	Координаты, (x, y, z), м	Значение C_a	Погрешность ε_N^*
а)	высоких концентраций	63, 35, 5	53,66	0,09 / 0,03
б)	переходная	80, 37, 6	23,41	0,12 / 0,04
в)	периферийная	90, 37, 5	6,372	0,19 / 0,06
г)	граница области	70, 36, 0	19,36	0,14 / 0,04

* числитель – при 500 испытаниях, знаменатель – при 5000 испытаниях

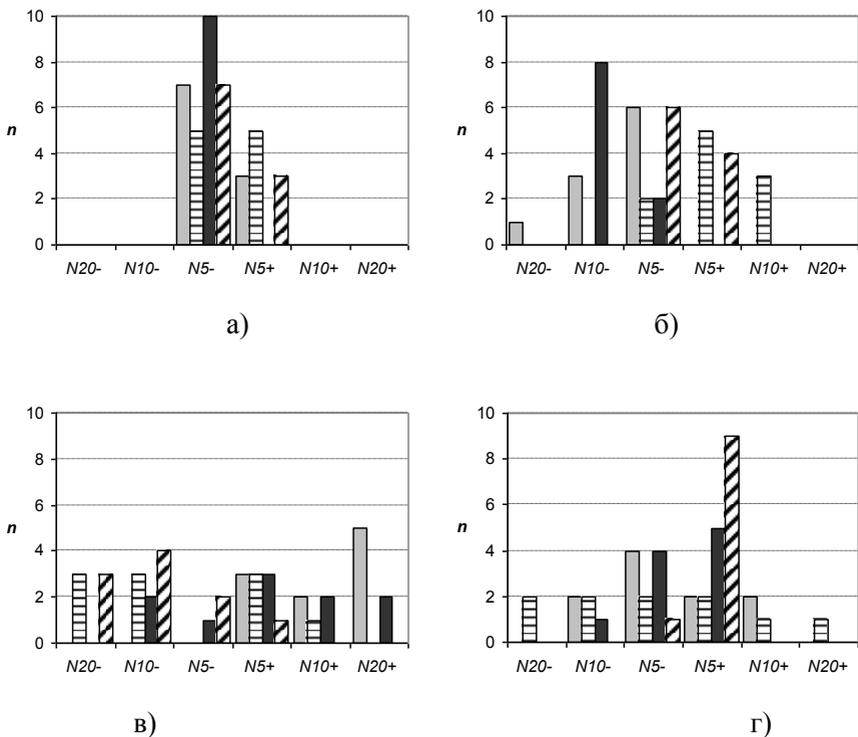


Рис. 4.5. Распределение значений концентрации, рассчитанных методом Монте-Карло, в окрестности значения C_a для варианта Б в момент времени 3000 сут.

	Зона	Координаты, (x, y, z), м	Значение C_a	Погрешность ϵ_N^*
а)	высоких концентраций	62, 36, 5	43,38	0,10 / 0,03
б)	переходная	90, 40, 5	23,94	0,13 / 0,04
в)	периферийная	100, 45, 5	2,53	0,37 / 0,13
г)	граница области	100, 40, 0	18,11	0,15 / 0,05

* числитель – при 500 испытаниях, знаменатель – при 5000 испытаниях

Как правило, вероятностная оценка относительной погрешности ε_N в соответствии с неравенством (4.22) превышает фактическую относительную погрешность. Несоблюдение указанного неравенства в отдельных случаях связано с наличием погрешности конечно-разностной аппроксимации (результаты расчета сходятся к пределу, смещенному относительно точного значения) и со статистическим характером сходимости.

На точность получаемых результатов практически не влияет увеличение расчетного времени t : доля результатов вне 10%-й окрестности не изменилась при $t=500$ и 3000 сут. Увеличение скорости конвективного переноса для варианта Б несколько ухудшает точность по сравнению с вариантом А: аналогичный показатель составил 13 и 8% соответственно.

На увеличение затрат машинного времени существенное влияние оказывает размер шага сетки: при его уменьшении вдвое время счета в контрольной точке возросло в среднем в 3,5 раза. Затраты машинного времени увеличиваются с ростом расчетного времени t и числа испытаний N .

На основании проведенных вычислений можно сделать такие выводы: 1) в большинстве случаев при достаточном числе испытаний метод дает хорошие и удовлетворительные результаты; 2) параметры переноса в основном диапазоне их значений несущественно влияют на точность метода, что свидетельствует о применимости разработанного алгоритма для реальных условий миграции; 3) в качестве верхней границы относительной погрешности может использоваться оценка (4.22).

Общая погрешность решения методом Монте-Карло складывается из двух составных частей, первая из которых имеет статистический характер, а вторая обусловлена конечно-разностной аппроксимацией. Снижение первой части достигается соответствующим увеличением числа испытаний, второй части – теми способами, которые применимы для сеточных методов.

При практическом использовании метода Монте-Карло необходимо придерживаться следующих рекомендаций. Во-первых, максимально точно аппроксимировать миграционные параметры и структуру области. Во-вторых, в тех подобластях, где расположены внутренние источники выделения веществ, шаг сетки следует дополнительно корректировать в соответствии с интегро-интерполяционным подходом [64]. Для оценки верхней границы относительной погрешности при известном точном значении C_a можно использовать величину

$$\varepsilon_{N,m} = \frac{x_{\beta}}{\bar{W}} \sqrt{DW/N} . \quad (4.23)$$

в которой вместо C_a подставлена оценка результата по итогам N испытаний. Дальнейшее увеличение числа испытаний N зависит от того, будет ли $\varepsilon_{N,m}$ меньше заданной пользователем величины максимально допустимой относительной погрешности. Вблизи границы и в зоне малых значений C целесообразно провести несколько независимых вычислений при разных шагах сетки, полагаясь в большей мере на результаты, полученные при меньшем шаге сетки.

4.3. Прогноз и контроль миграции трития из хранилища радиоактивных отходов*

В данном разделе представлены результаты прогноза миграции трития в районе пункта захоронения радиоактивных отходов (ПЗРО), расположенного в лесостепной зоне Приднепровской возвышенности. Прогноз выполнен с помощью алгоритма случайных блужданий, представленного в разделах 4.1, 4.2.

Площадка ПЗРО расположена на расстоянии 1,6 км от долины реки (абс. отм. 93 – 95 м) и в 100 м от днища оврага (абс. отм. 99 – 110 м), где протекает ручей. Ширина его заболоченной поймы 80 – 160 м, скорость течения 0,1 м/с, годовой поверхностный сток 583,5 тыс. м³.

Рассматриваемый объект (рис. 4.6, 4.7) характеризуется большой сложностью, как по геологической структуре области, так и по характеру влияния источников загрязнения. ПЗРО состоит из нескольких хранилищ жидких и твердых радиоактивных отходов (ЖРО и ТРО). Геологические разрезы участка ПЗРО представлены сверху верхнечетвертичными породами: супесями мощностью 7,8 – 13,4 м, ниже – пылеватыми песками с прослойками супесей мощностью 2 – 8 м. Их подстилают полтавские пылеватые пески мощностью 1 – 4 м, выклинивающиеся под ПЗРО, которые соседствуют с суглинками мощностью 0,5 – 6 м. Эти пески и суглинки залегают на киевских мергельных глинах, которые представляют собой водоупор.

* Раздел написан в сотрудничестве с отделом гидрогеологических исследований Днепропетровского отделения Украинского государственного геологоразведывательного института.

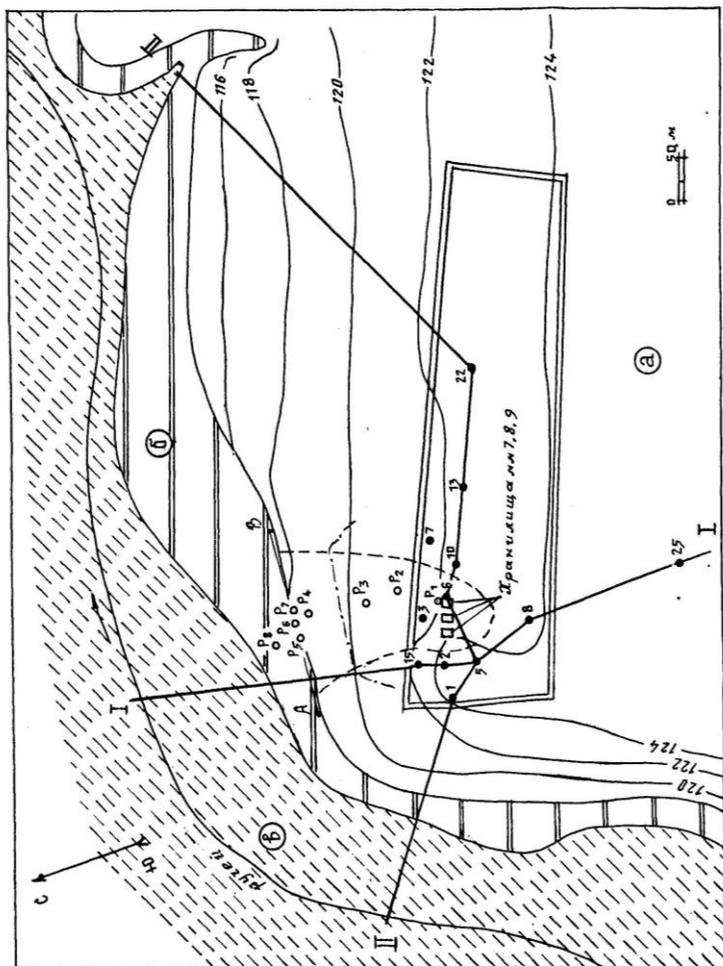


Рис. 4.6. Схема участка ПЗР: «а» – водонесный горизонт; «б» – область его выклинивания; «в» – пойма ручья; ===== – контуры ПЗР; —120— — изолинии уровня грунтовых вод; «I» – контрольные скважины; I – I, II – II – геологические разрезы.

Подземные воды распространены практически во всех перечисленных породах, залегающих выше глин, и составляют единый водоносный горизонт со свободной поверхностью, который в наибольшей степени подвергается опасности радиоактивного загрязнения. Питание этого горизонта осуществляется за счет инфильтрации атмосферных осадков (25 – 150 мм/год), разгрузка – в ручей. Абсолютные отметки уровня грунтовых вод изменяются от 116 до 125,2 м, максимальная мощность зоны аэрации – от 19 до 23 м. Водоносный горизонт характеризуется значительной неоднородностью фильтрационных и гидрогеохимических свойств (табл. 4.3). Поток подземных вод направлен в сторону ручья, но на участке ПЗРО вследствие фильтрационной неоднородности сформировался «купол». Поэтому здесь скорость фильтрации существенно меняется как по направлению (до 180°), так и по модулю (от $0,9 \cdot 10^{-3}$ до $1,2 \cdot 10^{-1}$ м/сут).

Из всего комплекса сооружений ПЗРО наибольшую опасность представляют хранилища ТРО, эксплуатация которых ведется, начиная с 1963 г. Состав захороненных в них РАО очень разнообразен, однако большая часть всей активности приходится на тритий. Данные обследования прилегающей к ПЗРО территории (табл. 4.4) выявили значительное превышение содержания ^3H в ряде контрольных скважин по сравнению с фоновым значением (10^{-10} Ки/л), причем по скв. №6 зафиксировано 2-3-кратное превышение ДК_Б ($4,0 \cdot 10^{-6}$ Ки/л).

Заметного увеличения концентраций других радионуклидов, содержащихся в ТРО, по сравнению с фоновыми значениями не обнаружено. Повышенное содержание трития в подземных водах связано с его высокой мобильностью: он практически не участвует в сорбционных процессах, поэтому допустимо принять $K_d = 0$. При прогнозе основное внимание было уделено хранилищам № 7, 8, 9, поскольку они содержат основные запасы трития и вблизи них обнаружены его наибольшие концентрации в подземных водах.

Объемы РАО в хранилищах №7, 8, 9 приведены в табл. 4.5. Они представляют собой железобетонные сооружения размером 10×15 м, заглубленные на 4,7 м, проектная емкость которых 400 м³. Защитные свойства инженерных барьеров были ослаблены вследствие попадания атмосферных осадков в хранилища, а также наличием пор и трещин в бетонных стенках, через которые возможна миграция ^3H .

Таблица 4.3

Параметры фильтрации и переноса на участке ПЗРО

Порода	Коэффициент фильтрации, м/сут	Эффективная пористость	Параметр гидро-дисперсии, м
Песок	1 – 4	0,15 – 0,25	1
Супесь	0,3 – 0,6	0,10 – 0,15	0,3 – 0,5
Суглинок	0,01	0,5	0,03

Таблица 4.4

Содержание трития в подземных водах в районе ПЗРО (март 1993 г.)

№ скважины	концентрация, Ки/л	№ скважины	концентрация, Ки/л
1	$(0,5 – 1,5) \cdot 10^{-9}$	7	$(2,1 – 8,5) \cdot 10^{-9}$
2	$(2,5 – 15,3) \cdot 10^{-8}$	8	$(0,08 – 8,9) \cdot 10^{-9}$
3	$(0,89 – 8,76) \cdot 10^{-7}$	10	$(0,8 – 6,0) \cdot 10^{-9}$
5	$(1,7 – 3,5) \cdot 10^{-7}$	13	$(0,3 – 11,0) \cdot 10^{-9}$
6	$(7,2 – 13,5) \cdot 10^{-6}$	15	$(0,1 – 1,2) \cdot 10^{-8}$

Таблица 4.5

Заполнение хранилищ радиоактивными отходами

Номер хранилища	Период заполнения, гг.	Удельная активность ^3H в поступавших РАО, Ки/м ³
7	1975 – 1992	5500
8	1985 – 1988	85
9	1986 – 1990	120

Из нескольких проектных вариантов дальнейшей эксплуатации хранилищ рассматривались следующие: А) их консервация; Б) перезахоронение ТРО в другое место, начиная с 1996 г., причем 1/6 всех отходов предполагалось извлечь за первые 5 лет, остальную часть – за следующие 5 лет.

Задачи радиоэкологического прогнозирования заключались в следующем: 1) определить зону распространения ^3H и его концентрацию в подземных водах в районе ПЗРО, 2) оценить возможность поступления трития в ручей при вариантах эксплуатации «А» и «Б» на проектный период до 2025 г.

Специфика условий миграции на данном участке может быть полностью учтена с помощью численной модели на основе метода Монте-Карло. В соответствии с алгоритмом по имеющейся гидрогеологической информации было проведено разбиение трехмерной области подземного массопереноса на объемные элементы с осредненными значениями компонентов скорости фильтрации, коэффициентов гидродисперсии и эффективной пористости. При разбиении учитывался наклон водоупора и переменная мощность водоносного горизонта. На его границе в связи с заболоченностью поймы принято условие III рода (2.16), в котором величина C_T принята равной средней активности трития в атмосферных осадках в районе ПЗРО (10^{-10} Ки/л). Скорость влагопереноса в зоне аэрации, начиная с глубины 5 м (уровень дна хранилищ) направлена вертикально вниз. Ее среднегодовое значение составило $2,7 \cdot 10^{-4}$ м/сут (100 мм/год).

Ввиду отсутствия надежных данных о массопереносе в дне и стенках хранилищ данного типа предполагалось, что в бетонном защитном экране имеются равномерно распределенные по всей его площади трещины, через которые происходит просачивание трития. Поэтому граница «бетон-грунт» приближенно рассматривалась как контакт пористой среды с радиоактивным раствором.

В период заполнения концентрация трития в хранилищах принималась пропорциональной его удельной активности в РАО. После заполнения согласно варианту «А» она снижалась по закону радиоактивного распада. При варианте «Б» с началом работ по перезахоронению ТРО с момента t_1 концентрация дополнительно снижалась пропорционально извлеченному объему отходов, а после окончания работ для $t > t_2 > t_1$ она принималась равной нулю.

Принятые исходные данные по активности источников корректировались с учетом имеющейся информации по наблюдательным скважинам (табл. 4.3), пробам, взятым в зоне аэрации на глубине 7 – 9 м вблизи хранилища №9 (концентрация ^3H $1,5 \cdot 10^{-5}$ Ки/л) и пробам, взятым в водонасыщенной зоне в пойме (точка Р₈, концентрация $1,8 \cdot 10^{-6}$ Ки/л). При уточненных параметрах активности источников утечек ^3H определяемые концентрации трития в указанных контрольных точках находи-

лись в диапазоне фактических значений или отклонялись от них максимально на 25%.

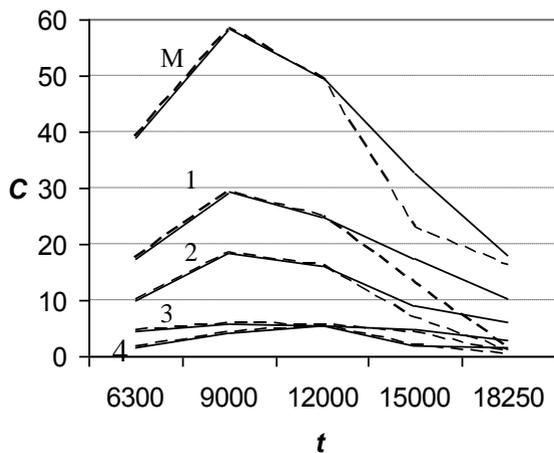
В ходе вычислений в различных точках области массопереноса были определены оптимальные с точки зрения точности и затрат машинного времени шаг сетки и число испытаний. Использование шага сетки 0,5 м и числа испытаний от 5000 до 10000 позволило добиться приемлемого разброса полученных значений (до 15 – 20% от среднего по результатам нескольких серий независимых испытаний), а приближенная вероятностная оценка относительной погрешности (4.22) снижалась до 0,15 – 0,25, что является допустимым в данных условиях. Поэтому при выполнении прогноза использовались указанные шаг сетки и число испытаний. Благодаря специфике метода оказалось возможным одновременно вычислять искомые величины сразу для вариантов «А» и «Б» на одних и тех же траекториях блуждания.

Применение метода Монте-Карло в данном случае позволило: а) провести локальную поточечную корректировку исходных данных по отдельным контрольным скважинам; б) полностью учесть пространственный характер миграции трития; в) одновременно вычислять концентрации ^3H сразу по двум вариантам; г) для определения контуров зоны распространения трития обойтись без решения задачи во всей области массопереноса.

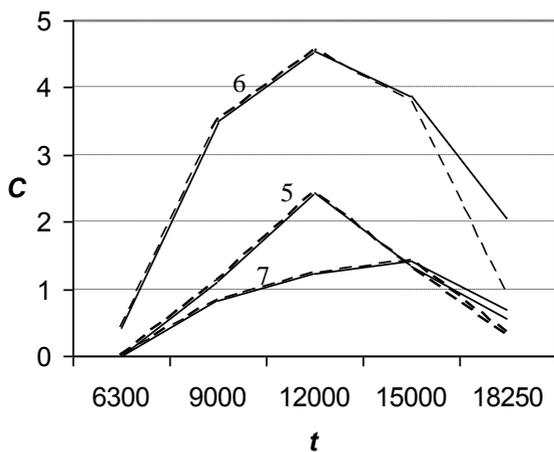
Результаты прогноза представлены на рис. 4.8 и отражены на рис. 4.6 (время в сутках отсчитывалось с 1975 г.). Сначала была определена динамика изменения во времени максимальных концентраций ^3H в подземных водах в районе ПЗРО непосредственно под хранилищами (линия с индексом «М» на рис. 4.8). Затем путем вычисления искомой концентрации в нескольких десятках точек области в разные моменты времени были определены контуры зоны влияния хранилищ ТРО № 7, 8, 9. В этой зоне, контуры которой обозначены на рис. 4.6 штриховой кривой, содержание трития в подземных водах за период прогноза повышалось более чем на 0,01 ДКБ.

Анализ результатов моделирования позволяет сделать следующие выводы относительно масштабов, уровня загрязнения подземных вод и динамики поступления трития в поверхностные воды.

1. Максимальные концентрации ^3H в подземных водах на данном участке за период прогноза могут превысить ДКБ в 14 – 15 раз, что говорит о серьезной радиоэкологической опасности данного объекта.



а)



б)

Рис. 4.8. Изменение концентрации трития в подземных водах C (мкКи/л) во времени t (сут): а) во внутренних точках P_1 (1), P_2 (2), P_3 (3), P_4 (4), максимальное значение (M); б) в точках на границе водоносного горизонта P_5 (5), P_6 (6), P_7 (7). Сплошные линии – вариант А, штриховые – вариант Б.

2. Загрязнение тритием подземных вод хотя и локализовано, но занимает существенную площадь: прогнозируемая зона максимального распространения трития с превышением 0,01 ДК_Б достигнет 2,5 – 3 га.

3. Максимальных значений концентрации трития в области массопереноса с превышением ДК_Б в несколько раз следует ожидать спустя 9000 сут с начала эксплуатации хранилищ или к 1999 г., а на границе области (при достижении уровня ДК_Б) – спустя 12000 сут или к 2008 г.

4. Влияние дополнительного ослабления активности источника по варианту «Б» (при начале работ по извлечению ТРО в 1996 г.) могло сказаться: вблизи ПЗРО спустя 12 лет ($t \approx 12000$ сут), на границе – спустя 20 лет ($t \approx 15000$ сут) после начала работ. Лишь к 2025 г. за счет перезахоронения ТРО по варианту «Б» и радиоактивного распада можно ожидать снижения концентрации трития во всей области до уровней, не превышающих ДК_Б. В то же время при консервации хранилищ по варианту «А» даже к этому сроку в водоносном горизонте останутся участки с содержанием ³H в подземных водах выше ДК_Б.

5. Вероятность поступления трития в ручей за счет подземного стока из водоносного горизонта в течение периода прогноза является весьма высокой. Следует, однако, учитывать задержку такого поступления, вызванную наличием широкой заболоченной поймы ручья и сезонным характером поверхностного стока. Максимальный среднегодовой вынос трития через границу составит 3,2 – 3,6 Ки. При этом расчете использовались следующие исходные данные: нормальная составляющая скорости фильтрации на границе не превышает 0,01 м/сут, на участке выхода трития на границу водоносного горизонта шириной до 200 м мощность водоносного горизонта не превышает 3 м. Полученные значения следует рассматривать как оценку сверху возможного поступления трития в ручей.

Результаты прогноза дают основание рекомендовать размещение наблюдательных скважин для контроля тритиевого загрязнения в зоне, очерченной пунктиром, как вблизи контрольных точек, для которых получены прогнозные значения, так и на периферии этой зоны.

Радиоактивному загрязнению на данном объекте подвергаются подземные и поверхностные воды. Верхний водоносный горизонт ввиду его малой мощности (менее 7 м) и близости к ПЗРО не представляет значительной хозяйственной ценности. Более опасным является поступление ³H в пойму и воды ручья, что может привести к радиоактивному загрязнению расположенных ниже по течению более крупных водотоков.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в монографии результаты исследований демонстрируют лишь некоторые возможности аналитических методов моделирования массопереноса в потоках подземных вод. Постоянное развитие вычислительной техники и совершенствование систем компьютерной математики (Maple, MathCad, Mathematica и т. п.) позволяет уже сейчас применять более сложные модели нестационарного массопереноса, в которых учитывается совместное влияние десятков и сотен источников различной формы и характера действия в двух- и трехмерных областях с различными типами границ.

Развитие метода аналитических элементов и применение конформных отображений наряду с предложенными в монографии способами учета неоднородности водоносных горизонтов существенно расширяет класс задач, для решения которых применимы разработанные модели. При этом можно избежать искусственной дискретизации области фильтрации, неизбежной для методов конечных разностей и конечных элементов, и получить результат с более высокой точностью.

Изучение конкретных случаев радиоактивного загрязнения подземных вод показывает, что оно часто носит локальный характер, а в фильтрационном потоке можно выделить основное направление миграции радионуклидов. В этом случае аналитические модели переноса веществ от линейных, площадных или объемных источников могут оказаться предпочтительнее по сравнению с численными алгоритмами с более высокой погрешностью аппроксимации источников на сетке.

Сущность метода статистических испытаний, примененного к решению задач массопереноса на основе алгоритма случайных блужданий, соответствует вероятностному характеру миграции в стохастически неоднородном массиве горных пород. Поэтому получаемое в ходе расчетов распределение значений концентрации характеризует неоднородность водоносных горизонтов, степень неопределенности исходных данных, а также пространственно-временные изменения зон в области миграции с различной чувствительностью к погрешностям параметров. Количественные оценки этих факторов особенно важны при характеристике сложных в гидрогеологическом отношении объектов.

Отмеченные преимущества аналитического и стохастического моделирования дают основание рекомендовать их более широкое использование, а в идеале – совместное применение с численными методами для прогноза и контроля миграции радионуклидов в подземных водах.

ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК

1. Агранович М.С., Вишик М.М. Эллиптические задачи с параметрами и параболические задачи общего вида // Успехи мат. наук. – 1964. – Т.19. – №3. – С. 53–161.
2. Анищенко О.Л., Рудаков Д.В., Шматков Г.Г. Моделирование загрязнения подземных вод в зоне влияния хвостохранилищ радиоактивных отходов. 1. Миграция нерадиоактивных микрокомпонентов // Екологія довкілля та безпека життєдіяльності. – 2004. – №1. – С. 96–104.
3. Арутюнян Р.В., Большов Л.А., Зенич Т.С. и др. Математическое моделирование вертикальной миграции в почве Cs-134,137 // Атомная энергия. – 1993. – Т.74. – Вып. 3. – С. 223–230.
4. Баренблатт Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М. Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа. – М.: Недра. – 1972. – 288 с.
5. Белицкий А.С. Охрана природных ресурсов при удалении промышленных жидких отходов в недра земли. – М.: Недра. – 1976. – 145 с.
6. Белицкий А.С., Орлова Е.И. Охрана подземных вод от радиоактивных загрязнений. – М.: Медицина. – 1968. – 208 с.
7. Белоусова А.П. К методике оценки естественной защищенности подземных вод от радиоактивных загрязнений // Водные ресурсы. – 1994. – Т.21. – №3. – С. 350–357.
8. Бочевер Ф.М., Лапшин Н.Н., Орадовская А.Е. Защита подземных вод от загрязнения. – М.: Недра. – 1979. – 224 с.
9. Бусленко Н.П., Голенко Д.И., Соболь И.М. Метод статистических испытаний (метод Монте-Карло). – М.: Физматгиз. – 1962. – 332 с.
10. Бэр Я., Заславски Д., Ирмей С. Физико-математические основы фильтрации воды. – М.: Мир. – 1971. – 452 с.
11. Вальтер А.К., Залюбовский И.И. Ядерная физика. – Харьков: Основа. – 1991. – 480 с.
12. Веригин Н.Н. Миграция растворенных и эмульгированных веществ при сбросах промышленных стоков в водоносные пласты. – М.: Труды института «ВОДГЕО», Инженерная гидрогеология. – Вып. 22. – 1969. – С. 35–39.
13. Веригин Н.Н., Васильев С.В., Куранов Н.П. и др. Методы прогноза солевого режима грунтов и грунтовых вод. – М.: Колос. – 1979. – 336 с.
14. Гидрогеологические исследования за рубежом / Под ред. Н.А. Маринова. – М.: Недра. – 1982. – 428 с.
15. Гладкий В.С. Вероятностные вычислительные модели. – М.: Наука. – 1982. – 300 с.
16. Гольдберг В.М., Газда С. Гидрогеологические основы охраны подземных вод от загрязнения. – М.: Недра. – 1984. – 262 с.
17. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. – М.: Физматгиз. – 1963. – 1100 с.

18. Гузенко В.В. Радиоактивная вода внутри «саркофага» имеет прямую связь с грунтовыми водами // Вестник Чернобыля, №37(556), 1994. – С. 2.
19. Гусев Н.Г., Дмитриев П.П. Радиоактивные цепочки: Справочник. – М.: Энергоатомиздат. – 1988. – 112 с.
20. Джепо С.П., Скальский А.С., Бугай Д.А. и др. Гидрогеологический мониторинг и прогнозирование загрязнения подземных вод в зоне отчуждения ЧАЭС // Доклады НАН Украины. – 1994. – №1. – С. 91–98.
21. Диткин В.А., Прудников А.П. Справочник по операционному исчислению. – М.: Высшая школа. – 1965. – 467 с.
22. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы. – М.: Наука. – 1975. – 472 с.
23. Ермаков С.М., Некруткин В.В., Сипин А.С. Случайные процессы для решения классических уравнений математической физики. – М.: Наука. – 1984. – 208 с.
24. Згуровский М.З., Скопецкий В.В., Хрущ В.К., Беляев Н.Н. Численное моделирование распространения загрязнений в окружающей среде. – К.: Наукова думка. – 1997. – 434 с.
25. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. – М.: Наука. – 1964. – 488 с.
26. Криксин Ю.А., Самарская Е.А., Тишкин В.Ф. Балансовая модель распространения примеси в плановом фильтрационном потоке // Математическое моделирование. – 1993. – Т.5. – №6. – С. 69–84.
27. Крылов В.И. Приближенное вычисление интегралов. – М.: Наука. – 1967. – 500 с.
28. Крылов Ю.В. Разностные схемы для уравнений параболического типа и континуальные интегралы. – В кн. Годунов С.К., Рябенский В.С. Введение в теорию разностных схем. М.: Физматгиз. – 1962. – С. 330–340.
29. Лавров Н.П., Канцель А.В., Лисицин А.К. и др. Основные задачи радиоэкологии в связи с захоронением радиоактивных отходов // Атомная энергия. – 1991. – Т.71. – Вып. 6. – С. 523–534.
30. Лаврик В.И., Фильчакова В.П., Яшин А.А. Конформные отображения физико-топологических моделей. – К.: Наукова думка. – 1990. – 376 с.
31. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уралцева Н.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. – М.: Наука. – 1967. – 736 с.
32. Лукнер Л., Шестаков В.М. Моделирование миграции подземных вод. – М.: Недра. – 1986. – 208 с.
33. Лыков А.В., Михайлов Ю.А. Теория тепло- и массопереноса. – М.-Л.: Энергоиздат. – 1963. – 536 с.
34. Лялько В.И. Методы расчета тепло- и массопереноса в земной коре. – К.: Наукова думка. – 1974. – 132 с.
35. Мироненко В.А., Румынин В.Г. Опытнo-миграционные работы в водоносных пластах. – М.: Недра. – 1986. – 240 с.

36. Мироненко В.А., Мольский Е.В., Румынин В.Г. Изучение загрязнения подземных вод в горнодобывающих районах. – М.: Недра. – 1988. – 279 с.
37. Мистецкий Г.Е. Автоматизация расчета массопереноса в почвогрунтах. – К.: Будивельник. – 1985. – 136 с.
38. Мосинец В.Н., Авдеев О.К., Мельниченко В.М. Безотходная технология добычи радиоактивных руд. – М.: Энергоатомиздат. – 1987. – 240 с.
39. Нормы радиационной безопасности НРБ-76/87 и Основные санитарные правила работы с радиоактивными веществами и другими источниками ионизирующих излучений ОСП-72/87. – М.: Энергоатомиздат. – 1988. – 160 с.
40. Огняник Н.С. Постоянно действующие гидрогеологические модели интенсивно осваиваемых территорий Украинской ССР. – К.: Наукова думка. – 1991. – 176 с.
41. Оценка состояния ограждающих дамб, баланса заполнения и влияния на подземные воды хвостохранилища «С» ПГМЗ по данным стационарных наблюдений: Отчет о НИР / УкрНИПИ протехнологии. – 2002. – 152 с.
42. Пивень В.Ф. О двумерной фильтрации в слоях с прерывно изменяющейся проводимостью вдоль кривых второго порядка // Изв. РАН, Механика жидкости и газа. – 1993. – №1. – С. 120–128.
43. Положий Г.Н. Уравнения математической физики. – М.: Высшая школа. – 1964. – 560 с.
44. Полубаринова-Кочина П.Я. Теория движения грунтовых вод. – М.: Наука. – 1977. – 664 с.
45. Полянин А.Д., Вязьмин А.В., Журов А.И., Казенин Д.А. Справочник по точным решениям уравнений тепло- и массопереноса. — М.: Факториал. – 1998. – 368 с.
46. Прохоров В.Н. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. Физико-химические механизмы и моделирование. – М.: Энергоиздат. – 1981. – 98 с.
47. Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917-1967) / Под ред. П.Я. Полубариновой-Кочиной. – М.: Наука. – 1969. – 546 с.
48. Рекс Л.М. Перераспределение солей в почвогрунтовой слое // Журнал прикладной математики и технической физики. – 1967.– №6. – С. 37–41.
49. Рихтмайер Р., Мортон К. Разностные методы решения краевых задач. – М.: Мир. – 1972. – 420 с.
50. Рудаков В.К. Моделирование задач конвективной диффузии солей в грунтах на АВМ и ЭВМ // Гидромеханика. – Вып. 38. – К: Наукова думка. – 1978. – С. 14–20.
51. Рудаков В.К. Формирование зон техногенных загрязнений в неглубоких потоках подземных вод // Водные ресурсы. – 1994. – Т. 21. – №1. – С. 15–24.
52. Рудаков В.К., Рудаков Д.В. Аналитические модели радиоактивного загрязнения подземных вод // Геологический журнал. – 1995. – №2. – С. 99–103.

53. Рудаков Д.В. Розв'язання задачі масопереносу радіоактивних речовин у підземних водах при дії джерел складної форми. – Деп. в ДНТБ України 20.07.94, рег. №1315, УК94. – 15 с.
54. Рудаков Д.В. Решение задачи подземного переноса радионуклидов методом Монте-Карло // Вопросы прикладной математики и математического моделирования. – Д.: ДГУ. – 1995. – С. 50–52.
55. Рудаков Д.В. Моделирование процесса концентрирования вблизи выходной границы фильтрационного потока в результате испарения // Вісник Дніпропетр. ун-ту. Серія Механіка. – 1998. – Вип. 1, т. 1. – С. 125–128.
56. Рудаков Д.В. Решение задачи совместного переноса вещества и продуктов его распада в фильтрационном потоке // Техническая механика. – 1999. – №1. – С. 153–158.
57. Рудаков Д.В. Оценка выноса загрязняющих веществ из фильтрационного потока в окружающую среду // Техническая механика. – 1999, – №2. – С. 109–116.
58. Рудаков Д.В. Оценка точности численного моделирования массопереноса в пористой среде вблизи внутреннего источника сложной формы // Вісник Дніпропетр. ун-ту. Механіка. – 2000. – Вип. 3, т. 1, – С. 137 – 142.
59. Рудаков Д.В. Прогнозирование загрязнения воздушной среды на основе модели с распределенными параметрами // Вісник Дніпропетр. ун-ту. Механіка. – 2002. – Вип. 6, т. 1. – С. 74–81.
60. Рудаков Д.В., Садовенко И.А. Расчет загрязнения шахтных вод на основе моделирования миграции в подработанном массиве // Сб. науч. тр. НГУ. – 2005. – №23. – С. 203–211.
61. Рудаков Д.В., Садовенко И.А., Петриченко П.Н.. Моделирование миграции фитотоксичных компонент в верхнем слое отвалов шахтных пород // Наук. вісник НГАУ. – 2001. – №5. – С. 134–135.
62. Рудаков Д.В. Математичні моделі в охороні навколишнього середовища: Навчальний посібник.– Д.: Вид-во Дніпропетр. ун-ту. – 2004. – 160 с.
63. Самарская Е.А., Четверушкин Б.Н., Чурбанова Н.Г и др. Моделирование на параллельных вычислительных системах процессов распространения примесей в горизонтах подземных вод // Математическое моделирование. – 1994. – Т.6. – №4. – С. 3–12.
64. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука. – 1971. – 552 с.
65. Ситников А.Б. Динамика влаги и солей в почвогрунтах зоны аэрации. – К.: Наукова думка. – 1986. – 152 с.
66. Снеддон И. Преобразования Фурье. – М.-Л.: ИЛ. – 1955. – 668 с.
67. Соболев И.А., Хомчик Л.М. Обезвреживание радиоактивных отходов на централизованных пунктах. – М.: Энергоатомиздат. – 1983. – 128 с.
68. Соболев И.М. Численные методы Монте-Карло. – М.: Наука. – 1973. – 312 с.

69. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука. – 1979. – 832 с.
70. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Наука. – 1977. – 736 с.
71. Фрид Ж. Загрязнение подземных вод. – М.: Недра. – 1981. – 304 с.
72. Церковский Ю.А., Угорец В.И. Оптимизационные модели при решении задач рационального отбора подземных вод и защиты их от загрязнения. – М.: Гидрогеология, инженерная геология: обзор. – ВИЭМС. – 1991. – 85 с.
73. Шнейдер П. Инженерные проблемы теплопроводности. – М.: ИЛ. – 1960. – 478 с.
74. Эккерт Э.Р., Дрейк Р.М. Теория тепло- и массообмена. – М.-Л.: Госэнергоиздат. – 1961. – 679 с.
75. Эмих В.Н. Решение одной плановой задачи неустановившейся фильтрации грунтовых вод методом статистических испытаний // Журнал ПМТФ. – 1968. – №4. – С. 163–168.
76. Ядерная энергетика, человек и окружающая среда / Н.С. Бабаев, В.Ф. Демин, Л.А. Ильин и др. – М.: Энергоатомиздат. – 1984. – 312 с.
77. Яковлев Е.А. Оценка защитной способности почв и грунтов в районах радиогеохимического влияния АЭС // Атомная энергия. – 1989. – Т. 67. – Вып. 3. – С. 207–210.
78. Янцевич А.А. Влияние разрывной тектоники на скорость миграции радионуклидов в аллювиальном водоносном горизонте // Геологический журнал. – 1993. – №1. – С. 88–95.
79. Ackerer Ph. Random-walk method to simulate pollutant transport in alluvial aquifers or fractured rocks // Ground-Water Flow and Quality Model.: Proc. NATO Adv. Res. Workshop, Lisbon, June 2-6, 1987. – Dordrecht etc. – 1988. – P. 475–486.
80. Bakker M. Transient analytic elements for periodic Dupuit-Forchheimer flow // Advances in Water Resources. – 2004. – V.27, iss.1, P. 3–12.
81. Bakker M., Hemker K. Analytic solutions for groundwater whirls in box-shaped, layered anisotropic aquifers // Advances in Water Resources. – 2004. – 27. – P. 1075–1086.
82. Barry D.A., Sposito G. Analytical solutions of convection-dispersion model with time-dependent coefficients // Water Resour. Res. – 1989. – Vol. 25, №12. – P. 2407–2416.
83. Berkowitz B. Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review // Advances in Water Resources. – 2002. – V.25, iss. 8–12. – P. 861–884.
84. Bolnavescu L. A non-convergent line method for solving two-dimensional equations of heat propagation by conduction and convection // Rev. roum. Sci. techn. Ser. Mech. appl. – 1992. – 37.– №1. – P. 75–89.

85. Brenner H. The diffusion model longitudinal mixing in beds of finite length. Numerical values // Chem. Engng. Sci. – 1962. – V.17. – P. 229–243.
86. Bruch J.C., Street R.L. Two-dimensional dispersion // Proc. Amer. Soc. Civil Engrs. – 1967. – Vol. 93. – №SA6. – P.17–39.
87. Bryant S.L., Paruchuri R.K., Saripalli K.P. Flow and solute transport around injection wells through a single, growing fracture // Advances in Water Resources, 2003. – V. 26, iss. 8/ – P. 803–813.
88. Castaing R. Un model simple pour la migration de radionuclides par transport colloidal dans un milieu fracture // J. Hydrol. – 1991. – 125. – №1-2. – P.55–92.
89. Chambre P.L., Lee W.-W. L., Kim C.L. and all. Transient and steady state radionuclide transport through penetrations in nuclear waste containers // Sci. Basis. Nucl. Waste Manag.: Proc. 10th Int. Symp., Boston, Mass., Dec. 1-4, 1986. – Pittsburgh (Pa). 1987. – P.131–140.
90. Chang-Lak K., Jhinwung K. Source term model for radioactive waste repository // High Level Radioact. Waste Manag.: Proc. 2nd Ann. Int. Conf. Las Vegas. Nev. Apr. 28 – May 3, 1991. – V. 2. La Grande Park (III); New York, 1991. – P. 1049–1053.
91. Cushman J.H. Dynamics of fluids in hierarchical porous media. – San Diego, USA: Academic. – 1990. – 505 p.
92. Didierjean S., Mailliet D., Moyne C. Analytical solutions of one-dimensional macrodispersion in stratified porous media by the quadrupole method: convergence to an equivalent homogeneous porous medium // Advances in Water Resources. – 2004. – V.27. – Iss.6. – P. 657–667.
93. Diersch H.-J. G. FEFLOW: Reference Manual. – WASI Institute, Berlin. – 1998. – 294 p.
94. Domenico P.A. An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species // J. Hydrology. – 1987. – 91. – №1-2, P. 49–58.
95. Ewing R.E. A modified method of characteristics for transport of nuclear-waste contamination in porous media // Comput. Mech'88: Theory and appl.: Proc. Int. Conf. Comput. Eng. Sci. Atlanta (Ga), Apr. 10-14, 1988, V. 2. – Berlin, 1988. – P. 50.11.1.–50.11.4.
96. Fares Y.R., Giacobbe D. Transient transport of reactive and non-reactive solutes in groundwater // Computers & Geosciences. – 2004. – V.30, iss.5. – P.483–492.
97. Flow and Transport in Fractured Porous Media / Ed. by G. Teutsch. – Springer. – 2005. – 465 p.
98. Fogden A., Landman K.A., White L.R. Contaminant transport in fractured porous media: steady state solutions by a boundary integral method // Water Resour. Res. – 1988. – Vol. 24. – №8. – P. 1384–1396.
99. Furman A., Neuman S.P. Laplace-transform analytic element solution of transient flow in porous media // Advances in Water Resources. – 2003. – V.26, iss.12. – P. 1229–1237.

100. Graham W., McLaughlin D. Stochastic analysis of nonstationary subsurface solute transport. 1. Unconditional moments // *Water Resour. Res.* – 1989. – V.25. – №2. – P. 215–232.
101. Guanguyu H. Numerical simulation for radionuclide transport into a single fracture in a porous formation // «Хуаньцзин кэсюэ сюзбао», *Acta sci. circumstantial.* – 1987. – V.7. – №3. – P. 253–260.
102. Haji-Sheikh A., Sparrow E.M. The floating random walk and its application to Monte Carlo solution of heat equations // *SIAM J. Appl. Math.* – 1966. – 14. – №2. – P. 370–389.
103. Hunt B.W. Dispersion from pit in uniform seepage // *Proc. Amer. Soc. Civil Engrs. J. Hydrology Div.* – 1973. – V.99. – №1. – P. 13–21.
104. Hunt B.W. Radial dispersion in groundwater flow // *Proc. Amer. Soc., Civil Engrs. J. Mech. Div.* – 1974. – V.100. – №6. – P. 1117–1127.
105. Jankovic I., Barnes R. Three-dimensional flow through large numbers of spheroidal inhomogeneities // *J. Hydrology.* – 226. – 1999. – P. 224–233.
106. Joshi S.R., Bobba A.C. Finite element modeling of transport of radium-226 and uranium from Port Granby radioactive waste management site to Lake Ontario // *Reliab. Radioact. Transf. Models.: Proc. Workshop «Meth. Assess. Reliab. Environ. Transf. Model. Predict.»* – London; New York. – 1988. – P. 193–200.
107. Kang C.H., Chambre P.L., Pigford T.H. and all. Near-field transport of radioactive chains // *High Level Radioact. Waste Manag.: Proc. 2nd Annu. Int. Conf. Las Vegas. Nev. Apr. 28 – May 3, 1991.* – V.2. – La Grande Park(III); New York. – 1991. – P.1054–1059.
108. Kawamura R. Three-dimensional computer code for groundwater flow, advection, diffusion and thermal conductivity in radioactive waste disposal using finite element method // *Comput. Mech'88: Theory and Appl.: Proc. Int. Conf. Comput. Eng. Sci. Atlanta (Ga), Apr. 10-14, 1988, V. 2.* – Berlin. – 1988. – P. 50.VIII.1–50.VIII.2.
109. Kinzelbach W. *Groundwater modeling.* – Amsterdam: Elsevier. – 1986. – 312 p.
110. Kinzelbach W. The random walk method in pollutant transport simulation // *Ground-Water Flow and Quality Model.: Proc. NATO Adv. Res. Workshop, Lisbon, June 2-6, 1987.* – Dordrecht etc. – 1988. – P. 227–245.
111. Leu Feike J., Dane J.H. Analytical solutions of the one-dimensional advection equation and two or three dimensional dispersion equation // *Water Resour. Res.* – 1990. – V.26. – №7. – P. 1475–1482.
112. Lindstrom F.T., Boersma L. Analytical solutions for convective-dispersive transport in confined aquifers with different initial and boundary conditions // *Water Resour. Res.* – 1989. – V.25. – №2. – P. 241–256.
113. Lu Z., Zhang D. On importance sampling Monte Carlo approach to uncertainty analysis for flow and transport in porous media // *Advances in Water Resources.* – 2003. – V.26, iss.11. – P. 1177–1188.

114. Luther K., Haitjema H.M. Approximate analytic solutions to 3D unconfined groundwater flow within regional 2D models // *J. Hydrology*. – 229. – 2000. – P. 101–117.
115. Marino M.A. Distribution of contaminations in porous media flow // *Water Resour. Res.* – 1974. – V.10. – №5. – P. 1013–1018.
116. Mehl S., Hill M.C. Three-dimensional local grid refinement for block-centered finite-difference groundwater models using iteratively coupled shared nodes: a new method of interpolation and analysis of errors // *Advances in Water Resources*. – 2004. – V.27, iss.9. – P. 899–912.
117. Montas H.J., Mohtar R.H., Hassan A.E., AlKhal F.A. Heuristic space–time design of monitoring wells for contaminant plume characterization in stochastic flow fields // *J. Contaminant Hydrology*. – 2000. – V.43. – P. 271–301.
118. Oldenburg C.M., Pruess K. Mixing with first-order decay in variable-velocity porous media flow // *Transport in Porous media*. – 1996. – V. 22. – P. 161–180.
119. Pigford T.H. Analytical methods for predicting contaminant transport // *C.r. Symp. anal. surete depots dechets radioact.*, Paris 9-13 oct., 1989 / *AEN – AEIA – CCE*. – Paris. – 1990. – P. 521–531.
120. Pinder G.F. A Galerkin finite-element simulation of groundwater contamination of Long Island, New York // *Water Resour. Res.* – 1973. – 6-9. – P. 1657–1669.
121. Quezada C.R., Clement T.P., Lee K.-K. Generalized solution to multi-dimensional multi-species transport equations coupled with a first-order reaction network involving distinct retardation factors // *Advances in Water Resources*. – 2004. – V.27, iss.5. – P. 507–520.
122. Rudakov D.V., Rudakov V.C. Analytical modeling of aquifer pollution caused by solid waste depositories // *Ground Water*. – V.37. – №3. – 1999. – P. 352–357.
123. Shen H.T. Transient dispersion in uniform porous media flow // *Proc. Amer. Soc. Civil Engrs.*, *J. Hydrology Div.* – 1976. – V.102, – №6. – P. 707–716.
124. Spizzichino K., Walton W.C. *Numerical Groundwater Modeling*. – CRC Press. – 1989. – 272 p.
125. Strack O.D.L. Principles of the analytic element method // *J. Hydrology*. – 226. – 1999. – P. 128–138.
126. Tanaka Y., Honma T. Boundary element solution of a three-dimensional convective-diffusion equation for large Peclet numbers // *Boundary Elem. Meth. Appl. Mech.*, *Proc. 1 st Joint Jap/US Symp. Boundary Elem. Meth.*, Tokyo, 3-6 Oct., 1988. – Oxford etc. – 1989. – P. 295–304.
127. Van Ommen H.C. Calculating the impact of a momentary input of a decaying solute and decay components on the quality of outflowing groundwater // *J. Hydrol.* – 1986. – 89, – №1-2. – P. 59-64.

128. Vassolo S., Kinzelbach W., Schäfer W. Determination of a well head protection zone by stochastic inverse modelling // *J. Hydrology*. – 206. – 1998. – P. 268–280.

129. Viswanathan H.S., Robinson B.A., Valocchi A.J. et al. A reactive transport model of neptunium migration from the potential repository at Yucca Mountain // *J. of Hydrology*. – 1998. – V. 209. – P. 251–280.

130. Wang H., Anderson M. *Finite Difference and Finite Element Methods*. – New York: Academic Press. – 1995. – 237 p.

131. Wen X.-H., Gomez-Hernandez J.J. Numerical modeling of macrodispersion in heterogeneous media: a comparison of multi-Gaussian and non-multi-Gaussian models // *J. Contaminant Hydrology*. – 1998. – V.30. – P. 129–156.

132. Wena X.H., Capilla J.E., Deutsch C.V. et al. A program to create permeability fields that honor single-phase flow rate and pressure data // *Computers & Geosciences*. – 1999. – V.25, iss.3. – P. 217–230.

133. West M.R., Kueper B.H., Novakowski K.S. Semi-analytical solutions for solute transport in fractured porous media using a strip source of finite width // *Advances in Water Resources*. – 2004. – V.27. – P. 1045–1059.

134. Yates S.R. An analytical solution for one-dimensional transport in heterogeneous porous media // *Water Resour. Res.* – 1990. – V.26. – №10. – P. 2331–2338.

135. Yen C.C., Hromadka T.V. The complex variable boundary element method in groundwater contaminant transport // *II Comput.Mech'86: Theory and Appl.: Proc. Int. Conf., Tokyo, May 25-29, 1986*. – V.2. – Tokyo e.a., 1986. – P. XI/137–XI/142.

136. Yunmian X., Yongxing Z., Binglin X. et al. Migration model for radionuclides in fissured rock // *Int. J. Rock Mech. and Mining Sci. and Geomech. Abstr.* – 1992. – 29. – №2. – P. 53–56.

Р 83 Рудаков Д.В. Моделирование массопереноса радионуклидов в потоках подземных вод: Монография. – Д.: Герда, 2010. – 160 с.

Представлены новые математические модели массопереноса радиоактивных веществ в подземных водах. Возможности разработанных моделей с использованием аналитических и вероятностных методов продемонстрированы на примерах прогнозов загрязнения подземных вод для реальных объектов.

Книга рассчитана на специалистов по гидрогеологии, радиозологии, атомной отрасли и проблем защиты окружающей среды, а также аспирантов соответствующих специальностей.

Рудаков Д.В. Моделювання масопереноса радіонуклідів у потоках підземних вод: Монографія. – Д.: Герда, 2010. – 160 с.

Представлені нові математичні моделі масопереносу радіоактивних речовин у підземних водах. Можливості розроблених моделей з використанням аналітичних та імовірнісних методів продемонстровані на прикладах прогнозів забруднення підземних вод для реальних об'єктів.

Книга розрахована на фахівців з гідрогеології, радіоекології, атомної галузі та проблем захисту навколишнього середовища, а також аспірантів відповідних спеціальностей.

Rudakov D.V. Modeling of radionuclide transport in ground water flows. Dnipropetrovsk, Gerda. 2010. – 160 p.

The new mathematical models for mass transport of radioactive substances in ground water are presented. The advantages of the developed models with using analytical and probabilistic methods are demonstrated by the examples of predicting ground water contamination on affected sites.

The book is addressed to experts in hydrogeology, environmental radiology, nuclear industry, environment protection, and postgraduates studying relevant problems.

CONTENT

Introduction.....	5
Nomenclature.....	7
1. Contemporary approaches to modeling radionuclide transport in ground waters.....	8
2. Development of analytical models of radionuclide transport.....	20
2.1. Formulation of main boundary value problems for mass transport in ground water flows.....	20
2.2. Modeling transport of species decaying by chain.....	30
2.3. Account for source size and boundary type in transport models.....	37
2.3.1 Splitting the transport equation.....	37
2.3.2 Analytical models of transport in 2D domains.....	42
2.3.3 Analytical models of transport in 3D domains.....	47
2.3.4 Calculation of mass flux through the boundary of the flow domain.....	51
2.4. Account for heterogeneities in analytical models.....	53
3. Studying the radionuclide transport features.....	60
3.1. Estimation of computational accuracy of analytical solutions..	60
3.2. Influence of transport parameters on forming the radioactive contamination zones in ground waters.....	65
3.3. Dynamics of radionuclide discharge into surface water bodies.	76
3.4. Account for 3D features of transport in predictions of ground water contamination.....	86
3.5. Prediction of radionuclide transport in ground waters on the area affected by the Chernobyl power plant.....	98
3.6 Prediction of radionuclide transport in the zone affected by a uranium mill tailings pond.....	106
3.7. Impact of input parameter deviations on the prediction accuracy.....	115
4. Modeling radionuclide transport by the Monte-Carlo method.....	120
4.1. Development of the random walk algorithm to solve the transport equation.....	120
4.2. Studying the accuracy of the algorithm for simulation.....	130
4.3. Prediction and control of tritium migration from a radioactive waste depository.....	139
Conclusion.....	148
References.....	149

ДЛЯ ЗАМЕТОК