

УДК 004.942

Д.А. СиницкаяДонецкий национальный технический университет, г. Донецк
кафедра системного анализа и моделирования**МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РАДИОАКТИВНЫХ
ПРИМЕСЕЙ В ВОЗДУШНОЙ СРЕДЕ****Аннотация**

Синицкая Д.А. Моделирование распространения радиоактивных примесей в воздушной среде. Выполнено математическое моделирование распространения радиоактивных примесей в атмосфере. Выбран оптимальный метод моделирования такого вида примесей и произведен расчет основных показателей и коэффициентов.

Ключевые слова: математическое моделирование, радиоактивные примеси, диффузия, закон Фика.

Постановка проблемы. Экологические проблемы загрязнения воздушной среды весьма актуальны для больших городов и крупных промышленных регионов. В настоящее время сильно возрос научно-практический интерес к математическому моделированию процессов загрязнения атмосферы радиоактивными примесями в районах атомных электростанций. Особенно это направление активизировалось после аварии на Чернобыльской АЭС.

Хотя с момента аварии на Чернобыльской АЭС прошло уже 27 лет, проблема радиоактивного загрязнения до сих пор является актуальной для Украины, поскольку, как известно радиоактивные элементы распадаются десятками, сотнями, а иногда и тысячами лет. Так, для урана ^{238}U период полураспада составляет 4,5 миллиарда лет, плутония ^{244}Pu – $2,44 \cdot 10^4$ лет, а цезия ^{137}Cs – 30 лет.

Наибольшую опасность представляют радиоактивные вещества с периодом полураспада от нескольких недель до нескольких лет: этого времени достаточно для проникновения таких веществ в организм растений и животных. Борьба с радиоактивным загрязнением среды может носить лишь предупредительный характер, поскольку не существует способов биологического разложения и других механизмов, позволяющих нейтрализовать этот вид заражения природной среды.

Судя по карте размещения атомных электростанций (рисунок 1), опасность радиационного загрязнения особо велика для северо-западного района Украины, поэтому актуальным остается вопрос о прогнозировании процесса распространения радиоактивных примесей в случае аварии на какой-либо из этих электростанций.

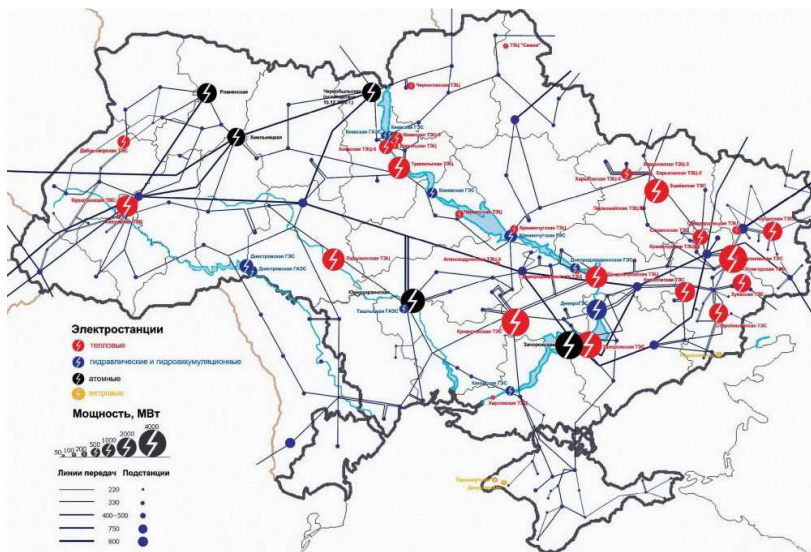


Рисунок 1 – Карта размещения электростанций на территории Украины

Математическое моделирование распространения примесей в воздушной среде является одной из наиболее значимых задач при решении проблемы определения района распространения и прогнозирования загрязнения воздуха, радиоактивными элементами от одного или нескольких источников. Объектами, загрязняющими природную среду, могут быть как объекты энергетики (электростанции), так и промышленные предприятия (заводы и фабрики). Пространственно-временные картины гипотетических выбросов одного или нескольких веществ из различных источников при разных погодных условиях могут быть использованы экспертами для определения потенциально опасных зон, зараженных соответствующими веществами, подготовки необходимых и своевременных мероприятий, адекватных складывающейся ситуации.

Поэтому, в случае реального выброса или утечки радионуклидов угроза заражения может потребовать незамедлительных действий по защите биосферы в целом и обеспечения безопасности здоровья людей в частности. Кроме того, модельный прогноз распространения концентраций загрязняющих веществ имеет огромное значение на этапе устранения последствий чрезвычайных ситуаций, которые могут иметь продолжительное воздействие на окружающую среду после относительно кратковременного выброса.

Анализ литературы. Разработке и исследованию математических моделей транспортно-диффузионного распространения радиоактивного загрязнения в атмосфере посвящены многочисленные научные труды как российских, так и зарубежных ученых: Алояна А.Е., Бакланова А.А.,

Борисевича М.Д., Брандта Д., Головизнина В.М., Златева З., Пененко В.В., Печингера У., Семенчина Е.А., Соренсона Д., Сухинова А.И., Тишкина В.Ф., Хирота М., и многих других. Также на сегодня разработано множество программ и программных комплексов, предназначенных для решения различных задач, связанных прогнозированием распространения примесей в атмосфере. Например, экологический программный комплекс «Zone» [1] позволяет рассчитывать рассеяние примеси в результате мгновенного и продолжительного выбросов. Он предназначен для оценки предельно допустимых концентраций. Или Recass – система информационной поддержки решения задач чрезвычайных ситуаций, связанных с аварийным загрязнением окружающей среды. Система «Нострадамус» [2], разработанная ВИБРАЭРАН, предназначена для расчета развития обстановки в результате аварий на ядерно-опасных объектах в реальном режиме времени. Благодаря этим комплексам были созданы разнообразные карты и карто-схемы, демонстрирующие радиационную ситуацию на территории Украины как до взрыва на ЧАЭС 1986-го года, так и после него[3].

Таким образом, в настоящее время программные комплексы разрабатываются на основе геоинформационных или экспертных систем, в структуре которых присутствуют моделирующие блоки. Расчеты проводятся с использованием моделей различной сложности, масштабности и оперативности. В связи с этим существует необходимость нахождения такого способа математического моделирования, который сможет наиболее адекватно отразить процесс распространения основных газообразных и аэрозольных радионуклидов в атмосфере в районах атомных электростанций и позволит максимально увеличить скорость работы с программой.

Постановка задачи исследования.Целью работы является разработка математической модели, описывающей процесс распространения радиоактивных примесей в воздушной среде.

Радиоактивные загрязнения классифицируют на первичные, вторичные и многократные [4]. Первичные загрязнения вызваны радиоактивными веществами, которые образовались в процессе аварии, производственной деятельности, взрывов ядерных боеприпасов. Вторичные радиоактивные загрязнения определяются переходом радиоактивности с загрязненных объектов на чистые. Радионуклиды с загрязненных сооружений, транспорта и дорог могут переходить обратно в воздушную среду, а затем оседать, загрязнять незагрязненные, а также уже грязные объекты. Один и тот же объект может за счет вторичных процессов загрязняться несколько раз. В этих условиях вторичные загрязнения становятся многократными. Вследствие сложности, для математической оценки, вторичного и многократного загрязнения, в данной работе будет рассматриваться модель первичного загрязнения, вызванного выбросом некоторого количества радиоактивных веществ в воздушную среду. С целью облегчения и ускорения программной и численной реализации были выбраны условия двумерного пространства. Речь

идет о кинетике диффузионно-контролируемых химических реакций в газах. Описание методов и проблем диффузионной кинетики довольно широко и полно обсуждено в ряде отечественных и зарубежных монографий [5, 6]. В этих работах основное внимание уделено методам решения уравнений диффузионной кинетики.

Экспериментально обнаружено, что законы Фика становятся применимыми уже по прошествии 10^{-13} с после того, как молекула начала диффундировать. Это позволяет заключить, что уравнения диффузии, выведенные из законов Фика, являются хорошим приближением для описания кинетики диффузионных процессов.

Теория кинетики реакций, контролируемых диффузией, была впервые сформулирована М. Смолуховским. Ее основная идея заключается в том, что скорость реакции может определяться медленным диффузионным движением, необходимым для сближения партнеров по реакции, после чего реакция протекает почти мгновенно.

Диффузией называется процесс переноса вещества, обусловленный самопроизвольным выравниванием его концентрации в первоначально неоднородной системе. В результате процесса диффузии устанавливается одинаковый химический потенциал каждого компонента во всех элементах объема системы. Если в пределах всей системы температура одинакова, то диффузия приводит к самопроизвольному выравниванию концентраций. В тех случаях, когда в системе имеется температурный или какой-либо другой градиент, влияющий на значение химического потенциала вещества, диффузия может привести даже к еще большему увеличению разности концентраций [7].

Решение задачи. Процессы диффузии описываются законами Фика. Второй закон Фика описывает изменение общей концентрации диффундирующего вещества в каждой точке среды:

$$\frac{dc_i}{dx} = D\Delta c_i + f(x, y, z, t), \quad (1)$$

где $\Delta = \nabla^2$ – оператор Лапласа; $f(x, y, z, t)$ – функция, описывающая рождение или гибель диффундирующих молекул в каждой точке среды.

В декартовых координатах оператор Лапласа имеет вид:

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2)$$

Для диффузии в одном направлении (одномерная диффузия) второй закон Фика записывается в следующем виде:

$$\frac{dc_i}{dt} = D \frac{d^2 c_i}{dx^2}. \quad (3)$$

Коэффициент диффузии является константой скорости диффузионного процесса. Он численно равен количеству вещества (в молях), проходящему через единицу площади (1 см^2) за единицу времени (1 с) при градиенте концентрации, равном единице (т.е. изменению концентрации в 1 моль/см^3 на расстоянии в 1 см). Размерность коэффициента диффузии:

$$[D] = \frac{\text{моль} \cdot \text{м} \cdot \text{м}^2}{\text{с} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{моль}} = \frac{\text{м}^2}{\text{с}} \text{ или } [D] = \frac{\text{см}^2}{\text{с}} \quad (4)$$

Величина коэффициента диффузии чаще всего оценивается из экспериментальных данных, однако его можно оценить из ряда известных соотношений.

Коэффициент диффузии молекул в газовой фазе равен:

$$D = \frac{1\bar{l}^2}{3\bar{\tau}} = \frac{1}{3}\bar{v}^2\bar{\tau}, \quad (5)$$

где \bar{l} , \bar{v} , $\bar{\tau}$ – средние величины длины свободного пробега, скорости и времени между столкновениями.

В случае нестационарной диффузии необходимо решать уравнение:

$$\frac{\partial c(x,y,z,t)}{\partial t} = D[c(x,y,z,t)] + f(x,y,z,t). \quad (6)$$

В этом случае кроме граничных условий искомое решение должно удовлетворять начальному условию:

$$c(x,y,z,0) = f(x,y,z). \quad (7)$$

Выбор граничных условий определяет и конечное выражение, полученное при решении уравнения (6). В данной работе было выбрано радиационное граничное условие на основе метода Смолуховского.

Идея метода Смолуховского сводится к учету химической реакции посредством введения соответствующего граничного условия при решении уравнения (6). Так называемое граничное условие Смолуховского относится к случаю, когда молекулы А и В при столкновении немедленно вступают в реакцию. При радиационном граничном условии столкновения между молекулами А и В могут не приводить к реакции. Тогда предполагается, что скорость реакции на реакционной сфере (радиусом R_c) равна потоку молекул через поверхность этой сферы.

Задача о диффузии частиц к стокам бесконечной емкости сводится к задаче о поглощающем центре. Изложим эту задачу.

Локальная концентрация частиц А в окрестности поглощающей сферы $c(r,t)$ будет зависеть только от времени t и расстояния r между центром поглощающей сферы и центром рассматриваемой частицы. Распределение

концентрации частиц А будет описываться уравнением для нестационарной диффузии:

$$\frac{dr_c}{dt} = D \frac{d^2(rc)}{dr^2}. \quad (8)$$

Система является сферически-симметричной, тогда для $r > R$, решение уравнения (8) дает изменение концентрации каждого компонента в форме соотношений:

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = -k_D c_B \int c_A(r_A, t) \delta'(|r_A| - R_c) dr_A, \quad (9)$$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = \frac{D}{r_A^2} \frac{\partial}{\partial r_A} \left(r_A^2 \frac{\partial c_A}{\partial r_A} \right). \quad (10)$$

Положим $c_A = c_{Ar}$. Тогда уравнение (10) принимает вид:

$$\frac{\partial c_{Ar}}{\partial t} = \frac{D}{r_A^2} \frac{\partial^2 c_{Ar}}{\partial r_A^2}. \quad (11)$$

Решение уравнения (11) методом Лапласа в изображениях имеет вид:

$$\bar{c}_{Ar} = B_1 \exp(-qr_A) + \frac{r_A c_A^0}{p}, \quad (12)$$

где величина $q = \sqrt{\frac{p}{D}}$, B_1 и B_2 – постоянные интегрирования, определяемые из граничных условий. Поскольку при $r_A \rightarrow \infty$ концентрация c_A ограничена, постоянная $B_2 = 0$. B_1 определяется из граничного условия:

$$4\pi R^2 D \left(\frac{\partial \bar{c}_{Ar}}{\partial r_A} \right) = k c_A, \quad (13)$$

или

$$(k + 4\pi R_c D) c_{Ar} = 4\pi R^2 D \left(\frac{\partial \bar{c}_{Ar}}{\partial r_A} \right)_{r_A=R}. \quad (14)$$

где $k_D = 4\pi R D \left(1 + \frac{R}{\sqrt{\pi D t}} \right)$ – константа скорости диффузионно-контролируемой бимолекулярной реакции; $R = r_A + r_B$ – сумма радиусов реагентов; $D = D_A + D_B$ – сумма коэффициентов диффузии реагентов.

При установлении стационарного режима (t велико) константа скорости диффузионно-контролируемой бимолекулярной реакции равна:

$$k_D = 4\pi R D. \quad (15)$$

При установлении стационарного состояния концентрации компонентов будут равны:

$$c(r, \infty) \equiv c(r) = c_0[1 - (R/r)]. \quad (16)$$

Подстановка выражения (12) в уравнение (14) дает:

$$B_1 = -\frac{kRc_A^0 \exp(qR_c)}{p(k+4\pi R_c D + 4\pi R_c^2 D q)}. \quad (17)$$

Отсюда следует, что для \bar{c}_{Ar} получается следующее выражение:

$$\bar{c}_{Ar} = \frac{c_A^0}{p} \left\{ \frac{kR_c \exp(-q(r_A - R_c))}{k+4\pi R_c D + 4\pi R_c^2 D q} \right\}. \quad (18)$$

Применяя к уравнению (18) обратное преобразование Лапласа, находим:

$$c_{Ar} = c_A^0 \left(r_A - \frac{kR_c}{k+4\pi R_c D} \left\{ \operatorname{erfc} \frac{r_A - R_c}{\sqrt{4Dt}} - \exp[h(r_A - R_c) + h^2 Dt] \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \operatorname{erfc} \left[h(Dt)^{1/2} + \frac{r_A - R_c}{\sqrt{4Dt}} \right] \right\} \right), \quad (19)$$

где $h = \left(\frac{1}{R_c} \right) \left[1 + \frac{k}{4\pi R_c D} \right]$.

С учетом того, что $c_A = \frac{c_{Ar}}{r}$, получим:

$$\frac{c_{Ar}}{c_A^0} = \left(1 - \frac{kR_c}{k+4\pi R_c D} \left\{ \operatorname{erfc} \frac{r_A - R_c}{\sqrt{4Dt}} - \exp[h(r_A - R_c) + h^2 Dt] \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \operatorname{erfc} \left[h(Dt)^{1/2} + \frac{r_A - R_c}{\sqrt{4Dt}} \right] \right\} \right). \quad (20)$$

Подстановка выражения (20) в уравнение (9) дает:

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} = -k_D c_A c_B(R_c, t). \quad (21)$$

Интегрируя это уравнение, находим

$$\frac{c_B}{c_B^0} = \exp \left[-k \int_0^t c_A(R_c, t) dt \right], \quad (22)$$

или

$$\frac{c_B}{c_B^0} = \exp \left(\begin{array}{c} -\frac{4\gamma t c_A^0 R_c D}{1+\gamma} - \frac{4\gamma^2 c_A^0}{h^3} \times \\ \times \left\{ 2h \left(\frac{Dt}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} - 1 + \exp \left(h^2 Dt \right) \operatorname{erfc} \left[h \left(Dt \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right\} \end{array} \right), \quad (23)$$

где $\gamma = \frac{k}{4\pi R_c D} = \frac{k}{k_D}$ определяет отношение константы скорости реакции к константе скорости, контролируемой диффузией и равной $4\pi R_c D$, а $h = \frac{(1-\gamma)}{R_c}$.

В случае, когда отношение γ мало, в приближении первого порядка по γ , можно преобразовать уравнение (23) к виду:

$$\frac{c_B}{c_B^0} = \exp(-kt c_A^0). \quad (24)$$

Это показывает, что, когда скорость химической реакции мала по сравнению со скоростью диффузии, мы имеем дело с обычной кинетикой реакции первого порядка.

Проведенный выше вывод справедлив только для реакций между сферически симметричными молекулами или атомами [7].

Выводы. Выполнено математическое моделирование распространения радиоактивных примесей в атмосфере. Выбран оптимальный метод моделирования такого вида примесей и произведен расчет основных показателей и коэффициентов. В дальнейшем, при программном моделировании, например, в среде Matlab, могут быть использованы два основных уравнения – (15) и (24). Это позволит визуально отобразить процесс распространения радиоактивных примесей в воздушной среде.

Список литературы

1. Р. Хокни, Дж Иствуд. Численное моделирование методом частиц. М: Мир, 1987.-640 с.
2. Халевин Р.Г., Бердников А.В. Компьютерные программы для экологов//Экологические системы и приборы 2002.-ЖЗ-С. 35-38.
3. <http://chornobyl.in.ua/karta-radionulid-ukraine.html>
4. Камерон И. Ядерные реакторы. М.: Энергоатомиздат, 1987. 320 с.
5. В.В. Федоров «Новый конвективно-диффузионный метод глобальной минимизации для решения обратных задач химической кинетики».
6. Франк-Каменецкий Д. А., Диффузия и теплопередача в химической кинетике, 2 изд., М., 1967.
7. Колпакова Н.А. Лекция «Кинетика диффузионно-контролируемых химических реакций», Томск 2010.