О МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ПЕРЕНОСА РАДИОАКТИВНЫХ ИЗОТОПОВ В ДОННЫХ ОСАДКАХ

П.М. Колесников[1], **Г.Ф. Батраков**[2], **Т.В. Чудиновских**[2]

[1] Научно-исследовательский центр «Энергоинформ» Белоруссия, г. Минск

[2]Морской гидрофизический институт НАН Украины
г. Севастополь, ул. Капитанская, 2
E-mail: oaoi@alpha.mhi.iuf.net

Приводятся аналитические решения уравнения переноса радиоактивных изотопов в пористых средах при различных начальных и граничных условиях.

Введение. Значительная часть радиоактивных изотопов, поступающих на поверхность океанов и морей, оказывается в донных отложениях. Из-за ряда факторов в некоторых районах формируются слои с повышенным и пониженным содержанием радиоактивных изотопов [1, 2]. В связи с этим происходит непрерывный процесс перераспределения радиоизотопов. Донные отложения во многих случаях можно рассматривать как капиллярно-пористые среды. Экспериментально изучать перенос изотопов в таких средах довольно сложно, поэтому целесообразно провести математическое моделирование.

Постановка задачи. Уравнение диффузии в пористо-капиллярной среде запишем в виде

$$\lambda c + w(x)\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = \nabla\left[D(x)\nabla c(x,t) + g(x,t)\right], \qquad (1)$$

где $w(x)$ – пористость среды, c – концентрация изотопа, λ – постоянная распада, $g(x,t)$ – источник изотопа.

Это линейное уравнение в частных производных второго порядка параболического типа будем решать при начальных условиях

$$c(x,0) = f(x) \qquad (2)$$

и различных граничных условиях

$$Bx(x,t) = \Phi(x,t), \qquad (3)$$

где B – линейный оператор граничных условий. Для граничных условий 1–3 родов оператор B имеет вид

$$B \equiv \alpha(x) + \beta(x)D(x)\frac{\partial}{\partial n}, \qquad (4)$$

где $\alpha(x), \beta(x)$ – коэффициенты, выбором которых можно менять тип граничных условий: при $\beta = 0$ имеем граничное условие 1 рода, при $\alpha = 0$ – граничное условие второго рода; n – нормаль к границе среды. Для неклассических граничных задач оператор может быть дифференциальным любого порядка, интегральным или интегро–дифференциальным.

Обозначив оператор правой части уравнения (1)

$$L \equiv -\nabla\left[D(x)\nabla\right] + d(x), \qquad (5)$$

перепишем уравнение (1) в операторной форме

$$-w(x)\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + Lc(x,t) = P(x,t). \qquad (6)$$

Общее решение. Рассмотрим интегрирование этого уравнения методом интегральных преобразований при начальных (2) и граничных (3-4) условиях.

Пусть $\Psi(x)$ – собственные функции, удовлетворяющие уравнению

$$\mu^2 w(x)\Psi(x) = L\Psi(x), \qquad (7)$$

и однородным граничным условиям

$$B\Psi(x) = 0, \qquad (8)$$

где μ – параметр, называемый собственным значением задачи (7-8), который может быть непрерывным или принимать дискретные значения. Каждому дискретному значению $\mu^2 \equiv \mu_i^2 (i = 1,2,\ldots)$ соответствует собственная функция $\Psi_i(x)$. Собственные функции и удовлетворяют уравнениям

$$\mu_i^2 w(x)\Psi_i(x) = L\Psi_i(x), \qquad (9)$$

$$\mu_j^2 w(x)\Psi_j(x) = L\Psi_j(x). \qquad (10)$$

Умножим (9) на μ_i, а (10) на μ_j, результат вычтем друг из друга и проинтегрируем по рассматриваемому объему, в результате получаем

$$\left(\mu_i^2 - \mu_j^2\right)\int_V w(x)\Psi_i(x)\Psi_j(x)dv = \int_V \left\{\Psi_i(x)\nabla\cdot\left[D(x)\nabla\Psi_j(x)\right] - \Psi_j(x)\nabla\cdot\left[D(x)\nabla\Psi_i(x)\right]\right\}dv. \qquad (11)$$

Преобразуя правую часть по теореме Грина, получим

$$\left(\mu_i^2-\mu_j^2\right)\int_v w(x)\Psi_i(x)\Psi_j(x)\,dv =$$
$$= \int_S D(x)\left[\Psi_i(x)\frac{\partial}{\partial n}\Psi_j(x) - \right. \tag{12}$$
$$\left. -\Psi_j(x)\frac{\partial}{\partial n}\Psi_i(x)\right]dS.$$

Вводя скалярное произведение двух функций с весом w

$$\left(f_2, f_2\right) \equiv \int_v w(x) f_1(x) f_2(x)\,dv, \tag{13}$$

запишем

$$\left(\Psi_i, \Psi_j\right) = \frac{1}{\mu_i^2-\mu_j^2}\cdot$$
$$\cdot\int_S w(x)\begin{vmatrix} \Psi_i(x) & \frac{\partial}{\partial n}\Psi_i(x) \\ \Psi_j(x) & \frac{\partial}{\partial n}\Psi_j(x)\end{vmatrix} dS \quad i \neq j \quad . \tag{14}$$

Если $\mu_i \to \mu_j$, то, раскрывая правую часть (14) по правилу Лопиталя, получим

$$N_i \equiv \left(\Psi_i, \Psi_i\right) = \frac{1}{2\mu_i}\cdot\int_S D(x)\cdot$$
$$\cdot\begin{vmatrix} \left(\frac{\partial\Psi(x)}{\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_i} & \left(\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial n\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_i} \\ \Psi_i(x) & \frac{\partial\Psi_i(x)}{\partial n}\end{vmatrix} dS, \tag{15}$$

откуда следует

$$\left(\Psi_i, \Psi_j\right) = \delta_{ij} N_i, \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j \\ 1 & i = j \end{cases}, \tag{16}$$

где N_i – квадрат нормы собственной функции, δ – символ Кронекера.

Решение (6) ищем в виде разложения по собственным функциям

$$c(x,t) = \sum_{i=1}^{\infty} A_i(t)\Psi_i(x). \tag{17}$$

Для определения коэффициентов ряда в (18) применим к обеим частям уравнения оператор $\int_v w(x)\Psi_j(x)dx$ и используем условие ортогональности функций (16)

$$A_i(t) =$$
$$= \frac{1}{N_i}\int_v w(x)\Psi_i(x)c(x,t)\,dv \equiv \frac{\left(\Psi_i, c\right)}{N_i}, \tag{18}$$

откуда следует интегральное преобразование

$$c_i(t) = \int_v w(x)\Psi_i(x)c(x,t)\,dv \equiv \left(\Psi_i, c\right). \tag{19}$$

Из (17) и (19) следует явный вид формулы обращения

$$c(x,t) = \sum_{i=1}^{\infty}\frac{1}{N_i}\Psi_i(x)c_i(t). \tag{20}$$

Для получения расчетных формул в методе конечных интегральных преобразований умножим уравнение (6) на ψ_i, уравнение (7) на ψ_j, результаты сложим, проинтегрируем по рассматриваемому объему и учтем определение интегрального преобразования (19) – в итоге имеем

$$w\frac{dc_i(t)}{dt} + \mu_i^2 c_i(t) = \int_v\left[\Psi_i\nabla\left(D\nabla c\right) - \right.$$
$$\left. - c\nabla\left(D\nabla\Psi_i\right)\right]dv + \int_v \Psi_i P\,dv. \tag{21}$$

Преобразуя объемный интеграл в поверхностный по формуле Грина, получим

$$w\frac{dc_i(t)}{dt} + \mu_i^2 c_i(t) = g_i(t),$$
$$g_i(t) = \int_S D(x)\begin{vmatrix} \Psi_i(x) & \frac{\partial}{\partial n}\Psi_i(x) \\ c(x,t) & \frac{\partial}{\partial n}c(x,t)\end{vmatrix} dS + \tag{22}$$
$$+ \int_v \Psi_i(x)P(x,t)\,dv.$$

Поверхностный интеграл вычисляется через операторы граничных условий (4) и (8), а именно:

$$\alpha\bar{c} + \beta D\frac{\partial\bar{c}}{\partial n} = \overline{\Phi}, \quad \alpha\Psi_i + \beta D\frac{\partial\Psi_i}{\partial n} = 0. \tag{23}$$

Формально решая эту систему относительно параметров α и β, найдем

$$D(x)\begin{vmatrix} \Psi_i(x) & \frac{\partial}{\partial n}\Psi_i(x) \\ \bar{c}(x,t) & \frac{\partial}{\partial n}\bar{c}(x,t)\end{vmatrix} =$$
$$= \overline{\Phi}(x,t)\frac{\Psi_i(x) - D(x)\left[\partial\Psi_i(x)/\partial n\right]}{\alpha(x)+\beta(x)}. \tag{24}$$

Тогда, подставив это соотношение в поверхностный интеграл (23), получим для определения коэффициентов разложения уравнение первого порядка

$$\frac{d\bar{c}(t)}{dt} + \mu_i^2\overline{T}_i(t) =$$
$$= \int_S \Phi(x,t)\frac{\Psi_i(x) - D(x)\left[\partial\Psi_i(x)/\partial n\right]}{\alpha(x)+\beta(x)}dS +$$
$$+ \int_v \Psi_i(x)P(x,t)\,dv. \tag{25}$$

Начальное условие для него следует из (2) и (19)

$$\bar{c}(0)=\int_v w(x)\Psi_i(x)f(x)dv \equiv \equiv (\Psi_i, f)\equiv \bar{f}_i. \tag{26}$$

Решение (25)–(26) находится методом вариации постоянной интегрирования

$$\bar{c}_i(t)=e^{-\mu_i^2 t}\left[\bar{f}_i+\int_0^t g_i(t')e^{\mu_i^2 t'}dt'\right], \tag{27}$$

где

$$g_i(t)=\int_S \Phi(x,t)\cdot \cdot\frac{\Psi_i(x)-\left[D(x)\partial\Psi_i(x)/\partial n\right]}{\alpha(x)+\beta(x)}dS+ + \int_v \Psi_i(x)P(x,t)dv. \tag{28}$$

Тогда формула обращения дает общее решение в интегральном виде

$$c(x,t)=\sum_{i=1}^{\infty}\frac{1}{N_i}e^{-\mu_i^2 t}\Psi_i(x)\cdot \cdot\left[\bar{f}_i+\int_0^t g_i(t')e^{\mu_i^2 t'}dt'\right],$$

$$N_i=\frac{1}{2\mu t}\int_S D(x)\cdot \tag{29}$$

$$\cdot\begin{vmatrix} \left(\dfrac{\partial\Psi(x)}{\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_i} & \left(\dfrac{\partial^2\Psi(x)}{\partial n\partial\mu}\right)_{\mu=\mu_i} \\ & \dfrac{\partial\Psi_i(x)}{\partial n}\end{vmatrix}dS.$$

Для неконсервативных примесей (радионуклидов и др.), у которых объемные и поверхностные источники во времени меняются по экспонентам

$$P(x,t)=P_e(x)\exp(-d_p t)+ + \sum_{j=0}^{q}P_j(x)t^j, \tag{30}$$

$$\Phi(x,t)=\Phi_e(x)\exp(-d_\Phi t)+ + \sum_{j=0}^{q}\Phi_j(x)t^j, \tag{31}$$

решение (29) примет вид

$$c(x,t)=c_\Phi(x)\exp(-d_\Phi t)+$$

$$+c_P(x)\exp(-d_P t)+\sum_{j=0}^{q}c_j(x)t^j+c_t(x,t),$$

$$w(x)\frac{\partial c_t(x,t)}{\partial t}+Lc_t(x,t)=0,$$

$$Lc_\Phi(x)=d_\Phi w(x)c_\Phi(x),$$

$$Lc_q(x)=P_q(x),$$

$$Bc_t(x,t)=0,\quad Bc_\Phi(x)=\Phi_e(x),$$

$$BT_q(x)=\Phi_q(x), \tag{32}$$

$$c_t(x,0)=f(x)-c_\Phi(x)-c_P(x)-c_0(x),$$

$$Lc_j(x)+(j+1)w(x)c_{j+1}(x)=$$

$$=P_j(x),\ Lc_p(x)=d_P w(x)c_P(x)+P_e(x),$$

$$Bc_j(x)=\Phi_j(x),\quad Bc_p(x)=0.$$

Некоторые примеры. Решение конкретных задач дадим на примерах для ряда геометрий. Перенос радионуклидов в дисперсных слоях конечной толщины и капиллярно–пористых телах простой геометрии (пластины, сферы и цилиндры) описывается одномерным уравнением диффузии

$$\lambda c+w\frac{\partial c(r,t)}{\partial t}= =D\frac{1}{r^{1-2m}}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^{1-2m}\frac{\partial c(r,t)}{\partial r}+g(r,t)\right] \tag{33}$$

при начальных условиях (2) и граничных условиях (3)–(5), которые возьмем в виде

$$\theta(X,\tau)=\frac{c(x,t)-c_i}{c_e-c_i},$$

$$\tau=\frac{Dt}{l_0^2},\ X=\frac{x}{l_0},\quad G=g\exp(\lambda t)\frac{l_0^2}{D}. \tag{34}$$

Подстановкой $c=\theta e^{\lambda t}$ для функции получаем обычное уравнение диффузии

$$X^{1-2m}\frac{\partial\theta(X,\tau)}{\partial\tau}=\frac{\partial}{\partial X}\left[X^{1-2m}\frac{\partial\theta(X,\tau)}{\partial X}\right]+$$

$$+X^{1-2m}G(x,\tau)\ m=\begin{cases}+\frac{1}{2}\\ 0\\ -\frac{1}{2}\end{cases} \tag{35}$$

с граничными и начальными условиями

$$X=0,\quad \frac{\partial\theta(X,\tau)}{\partial X}=0$$

$$X=1,\quad \alpha\theta(X,\tau)+\beta\frac{\partial\theta(X,\tau)}{\partial X}=\Phi(\tau)\quad \tau>0; \tag{36}$$

$$\tau=0,\ 0\le X\le 1,\quad \theta(X,\tau)+F(X).$$

Собственные функции определяются из задачи Штурма–Лиувилля

$$\left(\mu_i^2 w(X)\Psi_i=L\Psi_i\right)\quad \frac{\partial^2\Psi_i}{\partial X^2}+ +\frac{1-2m}{X}\frac{\partial\Psi_i}{\partial X}-\mu_i^2 w\Psi_i=0 \tag{37}$$

$$X = l_0 \alpha \Psi_i + \beta D \frac{\partial \Psi_i}{\partial n} = 0$$
$$X = 0 \quad \frac{\partial \Psi_i}{\partial X} = 0 \tag{38}$$

и выражаются в виде

$$\Psi_i(X) = X^m J_{-m}(\mu_i X), \tag{39}$$

где для плоского слоя $m = 1/2$

$$\Psi_i = A_i \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos \mu_i X + \beta_i \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \mu_i X\,, \tag{40}$$

для цилиндра $m = 0$ и собственные функции определяются через функции Бесселя нулевого и первого порядка действительного аргумента

$$\Psi_i = A_i J_0(\mu_i X) + \beta_i J_1(\mu_i X)\,, \tag{41}$$

для сферы $m = -1/2$ и собственные функции равны

$$\Psi_i = A_i \frac{1}{X} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos \mu_i X - \beta_i \frac{1}{X} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \mu_i X. \tag{42}$$

Собственные значения определяются как корни уравнения

$$\alpha J_{-m}(\mu) - \beta_\mu J_{1-m}(\mu) = 0\,, \tag{43}$$

а квадрат нормы равен

$$N_i = \frac{1}{2} [J_{1-m}(\mu_i)]^2 \cdot \left[1 + 2m \frac{\beta}{\alpha} + \left(\frac{\beta}{\alpha} \mu_i \right)^2 \right]. \tag{44}$$

Решение для θ выражается в интегральной форме

$$\theta(X,\tau) = 2 \sum_{i=1}^{\infty} \frac{exp(-\mu_i^2 \tau)}{1 + 2m \frac{\beta}{\alpha} + \left(\frac{\beta}{\alpha} \mu_i \right)^2} \cdot X^m \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{1-m}(\mu_i)} \cdot \left\{ \int_0^1 X^{1-m} \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{1-m}(\mu_i)} F(X) dX + \int_0^\tau exp(\mu_i^2 \tau') \left[\Phi(\tau') \frac{\mu_i}{\alpha} + \int_0^1 X^{1-m} \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{1-m}(\mu_i)} G(X,\tau') dX \right] d\tau' \right\}, \tag{45}$$

где $\theta_{av}(\tau) = 2(1-m) \int_0^1 X^{1-2m} \theta(X,\tau) dX$,

$$\theta_{av}(\tau) = 4(1-m) \sum_{i=1}^{\infty} \frac{exp(-\mu_i^2 \tau)}{1 + 2m \frac{\beta}{\alpha} + \left(\frac{\beta}{\alpha} \mu_i \right)^2} \frac{1}{\mu_i} \cdot \left\{ \int_0^1 X^{1-m} \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{1-m}(\mu_i)} F(X) dX + \int_0^\tau exp(\mu_i^2 \tau') \left[\Phi(\tau') \frac{\mu_i}{\alpha} + \int_0^1 X^{1-m} \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{1-m}(\mu_i)} \right] d\tau' \right\}. \tag{46}$$

В случае $\alpha = 0$ (граничное условие 2 рода) собственные функции и нормы равны

$$\Psi_i(X) = X^m J_{-m}(\mu_i X), \quad N_i = \frac{1}{2} [J_{-m}(\mu_i)]^2, \tag{47}$$

собственные значения определяются из уравнения

$$J_{1-m}(\mu) = 0\,, \tag{48}$$

а решение для θ имеет вид

$$\theta(X,\tau) = \theta_{av} + 2 \sum_{i=1}^{\infty} exp(-\mu_i^2 \tau) X^m \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{1-m}(\mu_i)} \cdot \left\{ \int_0^1 X^{1-m} \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{1-m}(\mu_i)} F(X) dX + \int_0^\tau exp(\mu_i^2 \tau') \left[\Phi(\tau') \frac{\mu_i}{\alpha} + \int_0^1 X^{1-m} \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{1-m}(\mu_i)} G(X,\tau') dX \right] d\tau' \right\}, \tag{49}$$

где

$$\theta_{av}(\tau) = 2(1-m) \cdot \left\{ \int_0^1 X^{1-m} F(X) dX + \int_0^\tau \left[\Phi(\tau') \frac{\mu_i}{\alpha} + \int_0^1 X^{1-m} G(X,\tau') dX \right] d\tau' \right\}, \tag{50}$$

Приведем решение первой краевой задачи для плоского слоя $m = \frac{1}{2}$, выраженное в безразмерных переменных для следующих условий

$$\Phi(\tau) \equiv \frac{c(l_0,t) - c_i}{c_e - c_i} = 1 - e^{-p\tau}\,,$$
$$p = \frac{\lambda l_0^2}{D} \quad F(X) = 0, \quad G(X,\tau) = 0, \tag{51}$$

$$\alpha = 1, \quad \beta = 0,$$

которое имеет вид

$$\theta(X,\tau) = 1 - X^m \frac{J_{-m}\left(X\sqrt{p}\right)}{J_{-m}\left(\sqrt{p}\right)} e^{-p\tau} - -2\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_i\left[1-\left(\mu_i^2/p\right)\right]} X^m \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{-m}(X)} e^{-\mu_i^2\tau}, \quad (52)$$

где μ_i – корни уравнения

$$J_{-m}(\mu) = 0\,. \quad (53)$$

Средняя концентрация слоя равна

$$\theta_{av}(\tau) = 1 - 2(1-m)\frac{J_{-m}\left(X\sqrt{p}\right)}{J_{-m}\left(\sqrt{p}\right)} e^{-p\tau} - -4(1-m)\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_i\left[1-\left(\mu_i^2/p\right)\right]} e^{-\mu_i^2\tau}. \quad (54)$$

В случае граничного потока, меняющегося по экспоненте

$$\frac{\partial\theta(1,\tau)}{\partial X} = Qe^{-p\tau}, \quad (55)$$

решение дается выражением

$$\theta(X,\tau) = \theta_{av}(\tau) + \theta_{\Phi}(X)e^{-p\tau} + \theta_t(X,\tau),$$

$$\theta_{av}(\tau) = 2Q(1-m)\frac{1-e^{-p\tau}}{p}, \quad (56)$$

$$\theta_{\Phi}(\tau) = Q\left[\frac{2(1-m)}{p} - X^m \frac{J_{-m}\left(X\sqrt{p}\right)}{J_{-m}\left(\sqrt{p}\right)}\right],$$

$$\theta_t(X,\tau) = -2Q\sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\mu_i^2 - p} X^m \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{-m}(\mu_i)} e^{-\mu_i^2\tau},$$

где μ_i – корни уравнения.

В случае граничного условия на поверхности третьего рода

$$\theta(1,\tau) + \frac{1}{B_i}\frac{\partial\theta(1,\tau)}{\partial X} = e^{-p\tau}, \quad (57)$$

решение имеет вид

$$\theta(X,\tau) = = \frac{X^m J_{-m}\left(X\sqrt{p}\right)}{J_{-m}\left(\sqrt{p}\right) - \left(\sqrt{p}/B_i\right)J_{1-m}\left(\sqrt{p}\right)} e^{-p\tau} - -2\sum_{i=1}^{\infty} \frac{\mu_i}{\mu_i^2 - p}\left[1 + \frac{2m}{B_i} + \left(\frac{\mu_i}{B_i}\right)^2\right]^{-1} \cdot X^m \frac{J_{-m}(\mu_i X)}{J_{-m}(\mu_i)} e^{-\mu_i^2\tau}, \quad (58)$$

где μ – корни уравнения

$$\frac{J_{-m}(\mu)}{J_{i-m}(\mu)} = \frac{\mu}{B_i}\,. \quad (59)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Гулин С.Б., Поликарпов Г.Г., Ааркрог А. И др. Геохронологическое исследование поступления ^{137}Cs в донные отложения северо-западного шельфа, континентального склона и глубоководной части Черного моря. ДНАНУ, 1997, № 7, с. 133-139.
2. Batrakov G.F., Chudinovskikh T.V., Zemlyanoy A.D., Eremeev V.N. On the geochemistry of Chernobyl ^{137}Cs and ^{90}Sr in the Black Sea. ДНАНУ, 1998, № 10, с. 122-126.