

МНОГОКОМПОНЕНТНЫЙ ДИФфуЗИОННЫЙ МАССОБМЕН

В ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЕ

Ю.В. Федорова, А.В. Лехов

При моделировании переноса концентрированных растворов сложного компонентного состава (промстоки, фильтраты свалок) применение традиционных аналитических моделей диффузии (закона Фика с постоянным коэффициентом диффузии, независимого расчета потоков компонентов) зачастую приводит к результатам, далеким от реальности для нормируемых компонентов.

Для описания диффузии многокомпонентных растворов электролитов используется теория Онзагера; движущей силой диффузии полагается градиент электрохимического потенциала [2, 4]. Расчет производится на оригинальной компьютерной программе. В модели также применен расчет фазовых равновесий с учетом комплексообразования путем организации совместной работы с программой NCh (автор Ю.В. Шваров). При параметризации модели рассмотрены зависимости ряда необходимых коэффициентов от концентрации раствора и внешних условий (температура, давление) [1].

В качестве примеров для модельного исследования рассмотрены два варианта закачки промстоков в глубокие водоносные пласты: полигон Сибирского химического комбината в г. Томск (соленый промсток закачивается в пресный водоносный горизонт) и полигон НИИ атомных реакторов в г. Димитровград (солончатый промсток закачивается в рассолы) [3].

Результаты моделирования показывают достаточно сложную картину распределения микрокомпонентов в блоке. Так, для СХК наблюдается выпадение кальцита и стронцианита на фронте миграции основной соли NaNO_3 и уменьшение пористости блока. Массовый поток стронция (нормируемый микрокомпонент) в блок значительно ниже предсказываемого моделями однокомпонентной диффузии.

Литература

1. Лехов А.В. Физико-химическая гидрогеодинамика. – М.: КДУ, 2010, 500 с.
2. Робинсон Р., Стокс Р. Растворы электролитов. – М.: Изд-во ин. лит., 1963, 646 с.
3. Рыбальченко А. И., Пименов М. К., Костин П. П., и др. Глубинное захоронение жидких радиоактивных отходов. – М.: ИздАТ, 1994, 256 с.
4. Felmy A. R. and Weare J. H. Calculation of multicomponent ionic diffusion from zero to high concentration: I. The system Na-K-Ca-Mg-Cl-SO₄ at 25 °C. Geochim. Cosmochim. Acta, 1991, № 1. P. 113-131.