

NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

PHYSICO-MATHEMATICAL SERIES

ISSN 1991-346X

Volume 5, Number 309 (2016), 188 – 194

UDC 517.958:531.72

A.S. Zhumali, G.V. Reshetova

Kazakh-British Technical University, Almaty, Kazakhstan
ainura_.89@mail.ru

**NUMERICAL MODELLING OF MICROSCOPIC DYNAMICS
OF IN-SITU LEACHING**

Abstract. Dissolution of the solid ground by an acid is one of sub-processes of in-situ leaching. The purpose of this work is a numerical simulation of these processes at the porous level. The case of two spatial variables is considered. We admit the fluid dynamics is described by stationary Stokes equations, while acid concentration is described by convection-diffusion equation. The problem is completed with boundary and initial conditions.

For numerical simulation of the process the method of finite differences on staggered grids is used. At each time step, the fluid velocity components are computed iteratively by successive over-relaxation method. The fluid pressure, the concentration of acid and the position of the free boundary are found using an explicit scheme. To define boundary condition for the acid concentration at the free boundary, the system of nonlinear equations is solved by iterative Newton method.

Results of numerical experiments are presented and discussed. In particular, one can see the motion of the free interface solid-liquid and mechanism of physical and chemical processes there.

Keywords: leaching, free boundary, microscopic model, numerical solution.

УДК 517.958:531.72

А.С. Жумали, Г.В. Решетова

Казахстанско-Британский технический университет, Алматы, Казахстан

**ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МИКРОСКОПИЧЕСКОЙ
ДИНАМИКИ ПОДЗЕМНОГО ВЫЩЕЛАЧИВАНИЯ**

Аннотация. Растворение твердого грунта кислотой является одним из подпроцессов подземного выщелачивания. Целью данной работы является численное моделирование таких процессов на микроуровне (на уровне пор). Математическая модель описывает динамику жидкости стационарными уравнениями Стокса. Динамика кислоты описывается уравнением диффузии-конвекции. Задача замыкается граничными и начальными условиями.

Для численного моделирования задачи применяется метод конечных разностей для случая двух пространственных переменных. Конечно-разностная аппроксимация уравнений строится методом баланса на сдвинутых сетках. На каждом шаге по времени компоненты скорости жидкости вычисляются методом верхней релаксации. Давление жидкости, концентрация кислоты и положение свободной границы находятся с использованием явной конечно - разностной схемы. Граничное условие для концентрации кислоты на свободной границе описывается системой нелинейных уравнений и решается итерационным методом Ньютона.

Ключевые слова: выщелачивание, свободная граница, микроскопическая модель, численное моделирование.

В статье приведены результаты численных экспериментов для различных значений начальной концентрации. Результаты расчетов позволяют проанализировать движение свободной границы и механизмы протекания физических и химических процессов выщелачивания на микроуровне.

Введение. Процесс подземного выщелачивания является экологически чистым методом добычи минералов, таких как уран, медь, никель, золото и т.д. Проводится он подачей активного раствора в пористый грунт, где раствор вступает в химическую реакцию с материалом твердого грунта. В результате в жидкость попадает продукт химического взаимодействия, а часть грунта подвергается растворению.

Данный физический процесс рассматривается в ограниченном объеме, который состоит из области, моделирующей поровое пространство, области, моделирующей твердый скелет и границы $X(y, t)$ между поровым пространством и твердым скелетом (Рис. 1). Граница $X(y, t)$ является неизвестной, поскольку в процессе выщелачивания часть грунта растворяется, и сам грунт деформируется во времени. Такие задачи называются задачами со свободными границами.

Различные частные случаи точных моделей фильтрации жидкости в горных породах исследовались многими авторами. Детальное рассмотрение можно найти в работе [1]. Наиболее систематически точные модели физических процессов в поровых средах исследованы в [2]. Эти модели на микроуровне исходят из известных уравнений механики сплошных сред [3] и химических законов [4].

Целью настоящей работы является численная реализация алгоритмов для описания процесса подземного выщелачивания в двумерном случае. С помощью численного моделирования исследуются положения границ выщелачивания грунта при различных значениях параметров, входящих в систему дифференциальных уравнений, а также концентрации кислоты в разные моменты времени.

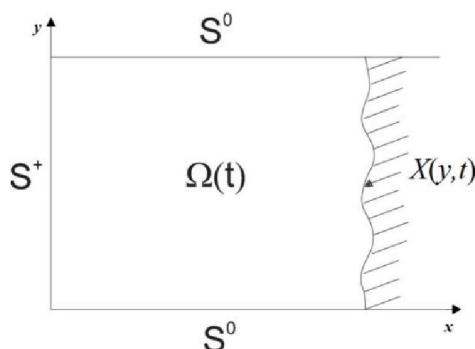


Рисунок 1 – Рассматриваемая область

Постановка задачи. Дифференциальные уравнения для компонент скорости жидкости \vec{v} , её давления p и концентрации кислоты c , в двумерной постановке имеют следующий вид:

$$\alpha_\mu \Delta \vec{v} - \nabla p = 0, \quad (1)$$

$$\varepsilon \frac{\partial p}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla c = \alpha_c \Delta c, \quad (3)$$

Краевые условия на свободной границе $X(y, t)$:

$$(V_n + \beta - v_n)c + \alpha_c \nabla c \cdot \vec{n} = 0, \quad (4)$$

$$v_n = -V_n \frac{(\rho_s - \rho_f)}{\rho_f}, \quad (5)$$

$$\vec{v} - v_n \vec{n} = 0, \quad (6)$$

$$V_n = \beta \gamma c, \quad (7)$$

где V_n - скорость движения свободной границы по направлению внешней нормали \vec{n} , v_n -

скорость жидкости по направлению вектора единичной нормали $\vec{n} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial X}{\partial y}\right)^2}} \left(1, -\frac{\partial X}{\partial y}\right)$. На

границе S^+ , которая моделирует нагнетательную скважину, нормальное напряжение в жидкости пропорционально известному давлению

$$(\alpha_\mu D(\vec{v}) - pl) \cdot \vec{n} = -p^+ \vec{n}, \quad (8)$$

$$c = c^+, \quad (9)$$

здесь l - единичная матрица и $D(\vec{v}) = \frac{1}{2}(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^*)$.

На непроницаемых для жидкости границах S^0

$$\vec{v} = 0, \text{ и } \nabla c \cdot \vec{n} = 0. \quad (10)$$

Начальные условия: $X(y,0) = X_0$, $c(x,y,0) = c_0(x,y)$, $(x,y) \in \Omega_0$.

Уравнения написаны в безразмерном виде. Здесь $\alpha_\mu = \frac{\mu}{TLg\rho_0}$, $\varepsilon = \frac{gL}{c_s^2}$, $\alpha_c = \frac{DT}{L^2}$, μ -

коэффициент вязкости, g - ускорение свободного падения, ρ_0 - плотность воды, c_s - скорость звука в жидкости, D - диффузионный коэффициент, T - характерное время, L - характерный размер области, β, γ - заданные константы, характеризующие химический процесс взаимодействия кислоты с породой, ρ_s, ρ_f - безразмерные плотности твердого скелета и жидкости, соответственно.

Численный метод. Численное моделирование выполняется методом конечных разностей. Конечно-разностная аппроксимация дифференциальных уравнений строится методом баланса на прямоугольных сдвинутых сетках. Для решения уравнения (1) на каждом шаге по времени используется метод верхней релаксации (SOR), а для уравнения (4) метод Ньютона.

Конечно-разностная аппроксимация уравнения (1), после применения метода SOR, покомпонентно запишется в виде:

$$v_x^{\alpha+1}_{i+\frac{1}{2},j} = (1-\omega)v_x^\alpha_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{\omega}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)} \times \left[\left(v_x^\alpha_{i+\frac{3}{2},j} + v_x^{\alpha+1}_{i-\frac{1}{2},j} \right) \Delta y^2 + \left(v_x^\alpha_{i+\frac{1}{2},j+1} + v_x^{\alpha+1}_{i+\frac{1}{2},j-1} \right) \Delta x^2 - \Delta x \Delta y^2 \frac{P_{i+1,j} - P_{i,j}}{\alpha_\mu} \right]. \quad (11)$$

$$v_{i,j+\frac{1}{2}}^{\alpha+1} = (1-\omega)v_{i,j+\frac{1}{2}}^{\alpha} + \frac{\omega}{2(\Delta x^2 + \Delta y^2)} \times \left[\left(v_{i+1,j+\frac{1}{2}}^{\alpha} + v_{i-1,j+\frac{1}{2}}^{\alpha+1} \right) \Delta y^2 + \left(v_{i,j+\frac{3}{2}}^{\alpha} + v_{i,j-\frac{1}{2}}^{\alpha+1} \right) \Delta x^2 - \Delta x^2 \Delta y \frac{P_{i,j+1} - P_{i,j}}{\alpha_{\mu}} \right] \quad (12)$$

где ω - параметр релаксации ($1 < \omega < 2$).

Конечно-разностный аналог уравнения (2):

$$p_{i,j}^{n+1} = p_{i,j}^n - \frac{\Delta t}{\varepsilon} \left[\left(v_{i+\frac{3}{2},j}^{n+1} - v_{i-\frac{1}{2},j}^{n+1} \right) / (2\Delta x) + \left(v_{i,j+\frac{3}{2}}^{n+1} - v_{i,j-\frac{1}{2}}^{n+1} \right) / (2\Delta y) \right] \quad (13)$$

Конечно-разностный аналог уравнения (3):

$$c_{i,j}^{n+1} = c_{i,j}^n + \Delta t \alpha_c \left[\frac{c_{i+1,j}^n - 2c_{i,j}^n + c_{i-1,j}^n}{\Delta x^2} + \frac{c_{i,j+1}^n - 2c_{i,j}^n + c_{i,j-1}^n}{\Delta y^2} \right] - \Delta t \left[v_{i+\frac{1}{2},j}^{n+1} \frac{c_{i+1,j}^n - c_{i,j}^n}{\Delta x} + v_{i,j+\frac{1}{2}}^{n+1} \frac{c_{i,j+1}^n - c_{i,j}^n}{\Delta y} \right] \quad (14)$$

Конечно-разностный аналог уравнения (4):

$$\frac{\rho_s}{\rho_f} \beta \gamma c_{N,0}^2 + \beta c_{N,0} + \alpha_c \frac{c_{N,0} - c_{N-1,0}}{\Delta x \sqrt{1 + [(X_1 - X_0)/\Delta y]^2}} = 0, \quad \text{при } y = 0, \quad (15)$$

$$\frac{\rho_s}{\rho_f} \beta \gamma c_{N,M}^2 + \beta c_{N,M} + \alpha_c \frac{c_{N,M} - c_{N-1,M}}{\Delta x \sqrt{1 + [(X_M - X_{M-1})/\Delta y]^2}} = 0, \quad \text{при } y = y_M, \quad (16)$$

$$c_{N,j+1} = c_{N,j} + \beta \Delta y^2 \frac{\sqrt{1 + [(X_{j+1} - X_j)/\Delta y]^2}}{\alpha_c (X_{j+1} - X_j)} \left(\frac{\rho_s}{\rho_f} \gamma c_{N,j}^2 + c_{N,j} \right) + \frac{\Delta y^2}{\Delta x (X_{j+1} - X_j)} (c_{N,j} - c_{N-1,j}), \quad \text{при } y = \overline{y_1, y_{M-1}}. \quad (17)$$

Уравнения (16), (17) решаются методом Ньютона:

$$c_{N,0}^{k+1} = c_{N,0}^k - \left\{ \frac{\rho_s}{\rho_f} \beta \gamma c_{N,0}^2 + \beta c_{N,0} + \alpha_c \frac{c_{N,0} - c_{N-1,0}}{\Delta x \sqrt{1 + [(X_1 - X_0)/\Delta y]^2}} \right\} / \left\{ 2\beta \gamma \frac{\rho_s}{\rho_f} c_{N,0} + \beta + \frac{\alpha_c}{\Delta x \sqrt{1 + [(X_1 - X_0)/\Delta y]^2}} \right\}, \quad (18)$$

$$c_{N,M}^{k+1} = c_{N,M}^k - \left\{ \frac{\rho_s}{\rho_f} \beta \gamma c_{N,M}^2 + \beta c_{N,M} + \alpha_c \frac{c_{N,M} - c_{N-1,M}}{\Delta x \sqrt{1 + [(X_M - X_{M-1})/\Delta y]^2}} \right\} / \left\{ 2\beta \gamma \frac{\rho_s}{\rho_f} c_{N,M} + \beta + \frac{\alpha_c}{\Delta x \sqrt{1 + [(X_M - X_{M-1})/\Delta y]^2}} \right\}. \quad (19)$$

С помощью простой явной схемы находим новое местоположение свободной границы выщелачивания:

$$X_j^{n+1} = \beta \gamma \Delta t c_{N,j}^{n+1} \sqrt{1 + [(X_{j+1} - X_j)/\Delta y]^2} + X_j^n \quad (20)$$

Результаты численных экспериментов. Было получено численное решение для микроскопической математической модели, описывающей взаимодействие активной примеси с твердым скелетом.

Ниже представлены расчеты по моделированию положения свободной границы, а также концентрации примеси для разных моментов времени для следующих параметров модели $\gamma = 1$,

$D = 2822 \frac{\text{МК}^2}{\text{с}}$, $L = 56 \text{ МК}$, $H = 42 \text{ МК}$, $T = 0.01 \text{ с}$. Результаты расчетов приведены на Рис. 2-5

для разных значений β , c^+ и разных моментов времени. На Рисунке 2 черной линией изображено начальное положение свободной границы, а остальными линиями изображены положения свободной границы в момент времени $T = 0.01 \text{ с}$ для разных значения коэффициента скорости химической реакции β . На Рисунке 3 черной линией изображено начальное положение свободной границы, а остальными линиями изображены положения свободной границы в момент времени $T = 0.01 \text{ с}$ для разных значения концентрации кислоты на входе c^+ . Свободная граница для большего значения постоянной β движется быстрее границы для меньшего β (Рис. 2). При подаче большей концентрации на входе c^+ грунт растворяется быстрее, чем при меньших значениях c^+ (Рис. 3). На Рисунке 4 изображена диффузия кислоты для разных моментов времени при постоянном значении концентрации кислоты на входе c^+ (в расчетах $\beta = 100$). На Рисунке 5 изображена диффузия кислоты для разных моментов времени при зависимости c^+ от вертикальной координаты y (в расчетах $\beta = 100$).

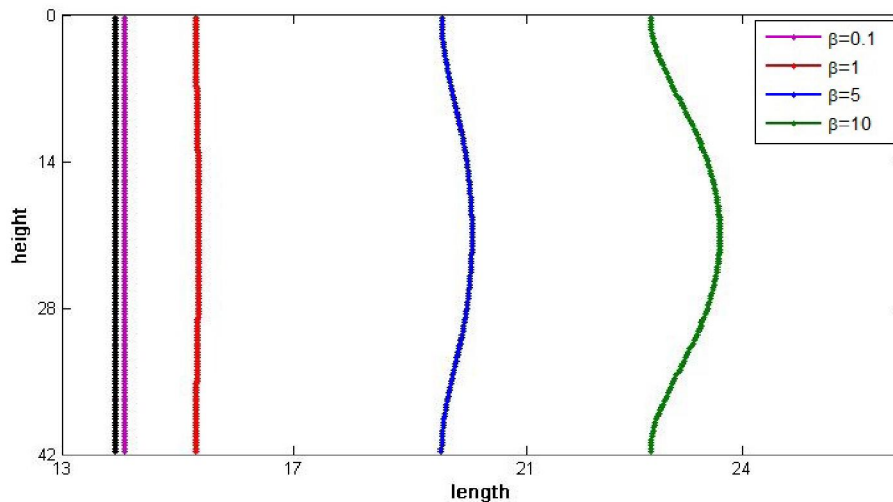


Рисунок 2 – Положения свободной границы при разных β

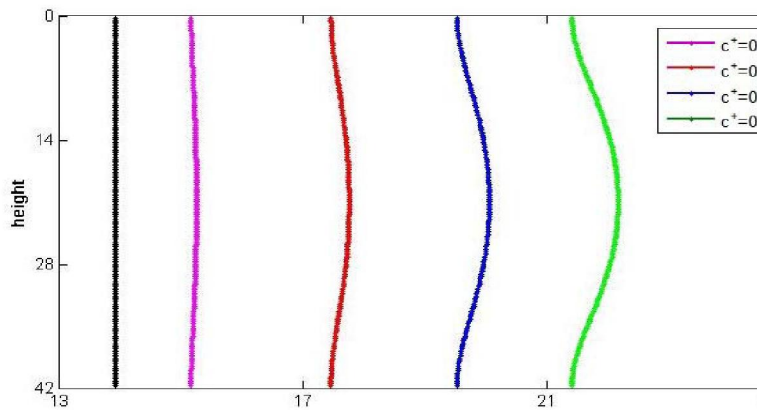


Рисунок 3 – Положения свободной границы при разных c^+

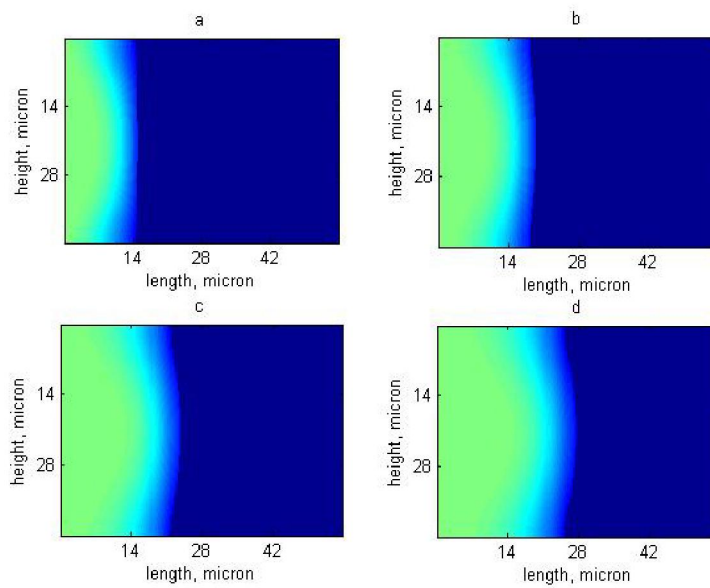


Рисунок 4 – Концентрация примеси в различные моменты времени:
 a - 0.0028 с., b - 0.0036 с., c - 0.0044 с., d - 0.0052 с.

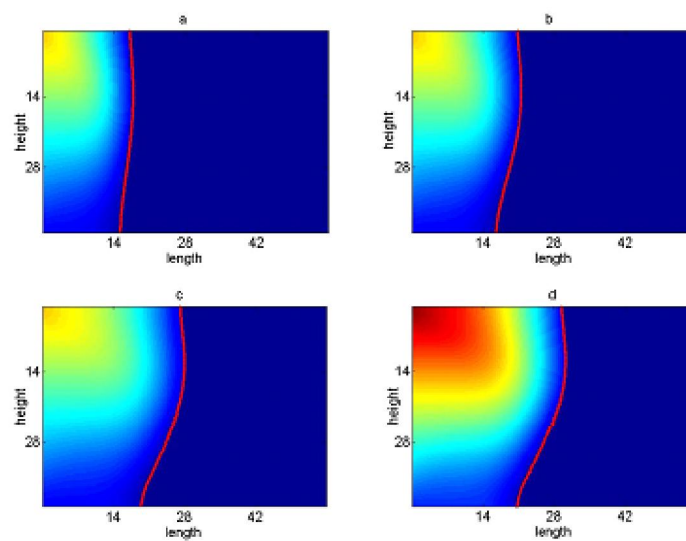


Рисунок 5 – Концентрация примеси при $c^+ = 0.7 - y_j / dy$ в различные моменты времени:
 a - 0.0028 с., b - 0.0036 с., c - 0.0052 с., d - 0.0064 с.

Заклучение. В работе рассматривается численное решение микроскопической математической модели, описывающей взаимодействие активной примеси с твердым скелетом. На основе метода баланса выводятся конечно - разностные уравнения, предлагается алгоритм численного решения на основе комбинации методов SOR, Ньютона и явных разностных уравнений. Приводятся результаты численных расчетов и их анализ.

Работа выполнена при частичной поддержке Казахского Фонда Фундаментальных Исследований, грант № 1771/ГФ4.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Burridge R., Keller G.B. Poroelasticity equations derived from microstructure // Journal of Acoustic Society of America. - 1981. - No. 4. - P. 1140–1146.
- [2] Meirmanov A. Mathematical models for poroelastic flows. - Paris: Atlantis Press, 2013.
- [3] Овсянников Л.В. Введение в механику сплошных сред. - Новосибирск: Новосибирский Государственный университет, 1977.
- [4] Ершов Ю.А., Попков В.А., Берлянд А.С., Книжник А.З. Общая химия. - М: Высшая школа, 2003. - 556 с.

REFERENCES

- [1] Burridge R., Keller G.B. *Journal of Acoustic Society of America*, **1981**, 1140–1146 (in eng.).
- [2] Meirmanov A. Mathematical models for poroelastic flows. Paris: Atlantis Press, **2013** (in eng.).
- [3] Ovsyannikov L.V. Introduction to continuum mechanics. Novosibirsk: Novosibirsk State University, **1977** (in rus.).
- [4] Ershov Y.A., Popkov V.A., Berlyand A.S., Knizhnik A.Z. General Chemistry. M: Vysshaya shkola, **2003**, 556 p. (in rus.).

А.С. Жұмәлі, Г.В. Решетова

Қазақ-Британ техникалық университеті, Алматы, Қазақстан

ЖЕРАСТЫ ЕРІТІНДІЛЕУДІҢ МИКРОСКОПИЯЛЫҚ ДИНАМИКАСЫН САНДЫҚ МОДЕЛДЕУ

Аннотация. Қышқылдың қатты денені ерітуі - жерасты ерітінділеудегі ішкі үрдістердің бірі болып табылады. Бұл жұмыстың мақсаты - сол үрдісті кеуектер деңгейінде сандық моделдеу. Кеңістік бойынша екі айнымалысы бар жағдайы қарастырылады. Есептің қойылымы бойынша сұйық динамикасы стационар Стокс теңдеулерімен сипатталады. Ал қышқыл динамикасы диффузия-конвекция теңдеуімен сипатталады. Есеп шекаралық және бастапқы шарттармен тұйықталады.

Есепті сандық моделдеу ақырлы айырымдар әдісімен жүзеге асырылады. Теңдеулердің ақырлы-айырымдық аппроксимациясы стандартты жылжытылған торлардың көмегімен құрылады. Уақыттың әр қадамында сұйық жылдамдығының компоненттері жоғарғы релаксация әдісімен есептеледі. Сұйық қысымы, қышқыл концентрациясы мен еркін шекараның орналасуы айқын сұлба қолдану арқылы табылады. Ал сызықсыз теңдеулер жүйесімен сипатталатын еркін шекарадағы қышқыл концентрациясына арналған шекаралық шарт итерациялық Ньютон әдісімен шешіледі.

Мақалада сандық моделдеу нәтижелері келтірілген. Нәтижелер арқылы еркін шекараның қозғалысы мен ондағы физикалық және химиялық үрдістердің өту механизмін көруге болады.

Түйін сөздер: ерітінділеу, еркін шекара, микроскопиялық пішін, сандық шешім.