

На правах рукописи

Храмченков Эдуард Максимович

**Математическое моделирование массопереноса
в природных набухающих средах**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Казань – 2007

Работа выполнена в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Казанский государственный университет имени В.И. Ульянова-Ленина», НИИММ им. Н. Г. Чеботарева.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор Плещинский Николай Борисович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор Сидоров Игорь Николаевич
доктор физико-математических наук,
профессор Никифоров Анатолий Иванович

Ведущая организация – С. Петербургский филиал Института геоэкологии РАН

Защита состоится 29 ноября 2007 г. в 16⁰⁰ на заседании диссертационного совета Д 212.081.21 в Казанском государственном университете по адресу: 420008, Казань, ул. Кремлевская, 18, корп. 2, ауд. 217

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского Казанского государственного университета

Автореферат разослан 27 октября 2007 года.

Ученый секретарь диссертационного
совета Д 212.081.21
к. ф.-м. н., доцент

Задворнов О. А.

Общая характеристика работы

В диссертации построена модель массопереноса в природных набухающих средах и решены некоторые задачи математического моделирования реологических процессов в набухающих системах.

Основные задачи исследования

На основе методов термодинамики набухающих систем разработать модели массопереноса в природных набухающих средах и исследовать в рамках этих моделей влияние различных факторов на физико-механические и физико-химические характеристики этих сред. С помощью разработанных моделей решить задачу об отборе воды из водоносного пласта, перекрытого взаимодействующим с ним слабопроницаемым набухающим глинистым слоем.

На базе методов теории массопереноса в набухающих средах разработать модель процесса закачки некоторого раствора в пласт, перекрытый набухающим глинистым слоем.

Актуальность темы

Набухающие системы традиционно являются объектом пристального внимания и исследования физико-химической механики, биомеханики и биофизики, физики полимеров, гидрогеологии и ряда других дисциплин. Примерами набухающих систем в природе являются почвы, глинистые горные породы, некоторые полимеры, а также некоторые полимолекулярные системы живых организмов. Обычно механика этих систем строится на основе эмпирических реологических моделей, мало, что говорящих о физической природе набухания в таких системах.

Существует настоятельная необходимость объединения чисто механических представлений о процессах в набухающих системах с физико-химическими свойствами таких систем, общими как для неорганических, так и для органических объектов. Для этого необходимо выбрать такое свойство природных набухающих сред, которое бы фигурировало как в описании физико-механических свойств природных набухающих сред, так и в описании их физико-химических свойств. На наш взгляд, таким свойством может быть

осмотическое давление в набухающих системах, являющееся «движущей силой» процесса набухания.

Осмотическое давление является причиной перетока флюида в твердую матрицу (из твердой матрицы в случае усадки набухающих сред) и появлению дополнительных напряжений, останавливающих, в конечном счете, процесс набухания. Поэтому природную набухающую среду можно рассматривать как пористую среду с набухающим скелетом. В качестве модели, описывающей механику пористых сред, можно выбрать хорошо исследованную модель фильтрационной консолидации, при этом последнюю необходимо обобщить на случай пористого скелета переменной массы.

Важным моментом при получении замкнутой системы уравнений механики пористых сред являются так называемые реологические соотношения, связывающие возникающие деформации среды с вызвавшими их эффективными напряжениями.

Получение таких соотношений является достаточно трудоемким процессом. В нашем случае использование «априори» навязанных реологических соотношений было бы просто нежелательно. Мы не будем заранее ставить цель получить такие соотношения, а попытаемся использовать всю возможную информацию о поведении природных набухающих систем с тем, чтобы реологические свойства таких систем появлялись бы в модели наиболее естественным путем.

В руководстве работой принимал участие д.ф.-м.н., проф. М. Г. Храмченков (постановки задач, сравнение с экспериментом, анализ результатов).

Научная новизна работы

Результаты диссертации являются новыми. На основе теории массопереноса и химической термодинамики получены уравнения физико-химической механики природных набухающих сред (глины и почвы). Построена математическая модель физико-механических свойств природных набухающих пористых сред. Поставлена и решена задача о водоотдаче глинистого слоя в водоносный пласт, вскрытый совершенной скважиной. Построена модель процесса закачки раствора в водный пласт, перекрытый набухающим глинистым слоем, и решена соответствующая задача.

Достоверность научных результатов обеспечивается применением при разработке физико-математических моделей общих законов и уравнений термодинамики и механики сплошных сред. Проведенный сравнительный анализ решений полученных уравнений показывает соответствие этих результатов с экспериментальными данными.

Научно-практическое значение работы

- создана математическая модель набухания пористой матрицы, описывающая влияние загрязнения на набухание и водоудерживающую способность среды;
- создана математическая модель массопереноса в набухающих природных пористых средах, позволяющая оценить изменения физико-механических и физико-химических свойств сред вследствие механического и химического воздействия;
- построены решения основных задач по нелинейной водоотдаче набухающих сред;
- создана математическая модель и получены решения для процесса закачки в пласт, перекрытый набухающим глинистым слоем, раствора, содержащего загрязняющие природную среду компоненты (задача о подземном захоронении жидких загрязнений).

Апробация работы

Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях: 17-th Conference on Clay Mineralogy and Petrology, Prague, 13-17.09.2004; международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование», г. Саров, 5-8 октября 2004 г.; XI-е Всероссийские Толстихинские чтения, г. С.Петербург, 30 ноября – 1 декабря 2004г.; международная научная конференция «Проблемы инженерной геодинамики и экологической геодинамики», г. Москва, 2-3 февраля 2006 г.; International school on flexible electronics, Suvon, Korea, 02-11. 04. 2007.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 11 работ, в том числе две статьи в издании из списка ВАК.

Структура и содержание работы.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованных источников, содержит 85 страниц сквозной нумерации, в том числе 23 рисунка; список литературы насчитывает 105 наименований, в том числе публикации автора по теме диссертации – 11 наименований.

Во введении обсуждается актуальность темы, формулируются цель и положения, выносимые на защиту. Приводится обзор работ, имеющих отношение к результатам автора. Дается анализ структуры и содержания диссертации.

Первая глава посвящена некоторым задачам, связанным с термодинамическими характеристиками природных набухающих сред (глинистые породы, набухающие грунты, почвы), т. е. сред, содержащих так называемую связанную влагу. Необходимо отметить, что по этому вопросу имеется обширная литература (цитирование осуществляется в соответствии со списком литературы диссертационной работы). В данное исследование не входило подробное изложение основных результатов по термодинамике связанной влаги. За этим можно обратиться к работам (*Дерягин и др., 1987; Осипов, 1979; Спозито, 1984; Iwata, 1972, 1974*). Основное внимание при расчетах уделялось необходимому уточнению классических результатов по осмотическому равновесию в горных породах и почво-грунтах как природных ионообменных системах (*Гельферих, 1962*). Для моделирования физико-механических свойств природных набухающих сред на основе принципа доннановского равновесия (*Гуггенгейм, 1941*) были использованы результаты работ (*Храмченков М.Г., 2003; Храмченков М.Г. и др., 2007*).

Первый параграф первой главы посвящен описанию глин и набухающих почво-грунтов как природных ионообменных систем, чья способность к набуханию обусловлена наличием электрического заряда у структурных частиц системы, который компенсируется за счет адсорбции катионов из раствора. Поскольку условия равновесия в таких системах (доннановское равновесие)

должны дополняться условиями электрической нейтральности системы в целом (Храмченков М.Г., 2003; Храмченков М.Г. и др., 2007), то можно прийти к новым уравнениям, позволяющим описывать процесс набухания при известных значениях определенных параметров (т. н. принцип осмотических ячеек).

Второй параграф первой главы посвящен анализу уравнений равновесия в осмотических ячейках. В частности, было получено условие набухания природной пористой среды, связывающего давления в поровом растворе и напряжения в среде с концентрацией ионов в растворе и природной ионообменной системе. Данное уравнение позволяет интерпретировать полученные результаты с точки зрения механики насыщенных пористых сред (Николаевский, 1996) и, таким образом, связать основные параметры физико-химического характера с параметрами, имеющими физико-механический смысл.

Вторая глава посвящена выводу основных уравнений механики природных набухающих сред, учитывающие эффект от перехода воды из транспортных пор в состав связанной в агрегатах среды влаги или обратно (набухание/усадка). Основные уравнения получены на основе обобщения подходов (Костерин, 2003; Smiles, 1974; Thomas et al., 1993). Первый параграф второй главы посвящен уравнениям физико-химической механики природных набухающих сред. Основным результатом получен как расширение результатов для набухающих систем, находящихся в условиях равновесия, на деформируемые набухающие системы, находящиеся в неравновесных условиях. Результирующие уравнения имеют ясный физический смысл. Задача об усадке набухающего слоя глины сводится к системе уравнений

$$\bar{p} + \bar{\sigma} = 1, \quad (1)$$

$$\bar{\pi} = \frac{\delta}{v_0 - v_s}, \quad (2)$$

$$v_0 = 1 + \theta, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \chi \frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial y^2}, \quad (4)$$

$$\bar{\sigma} = \bar{\pi}. \quad (5)$$

Здесь \bar{p} , $\bar{\sigma}$ – безразмерные давление в воде и эффективное напряжения в глине соответственно, $\bar{\pi}$ – безразмерное осмотическое давление, θ – усадка, v_0 – объем среды, v_s – объем собственно твердой фазы в составе среды,

$\chi = T_0 k \Gamma / (\eta L^2)$, T_0 – характерный масштаб времени, L – характерный масштаб длины, Γ – внешняя нагрузка, k – проницаемость глины, η – вязкость воды, $\delta = eRT / (2\Gamma V_0^{(0)})$, $V_0^{(0)}$ – начальный объем среды, e – емкость катионного обмена $V_0^{(0)}$, R – универсальная газовая постоянная, T – температура.

Из (1), (2), (3) и (5) легко получить

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} = \frac{\delta}{(1 - \bar{p})^2} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \tau}. \quad (6)$$

Тогда из (4) с учетом (6) следует

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial \tau} = \bar{\chi} (1 - \bar{p})^2 \frac{\partial^2 \bar{p}}{\partial y^2}. \quad (7)$$

$$\bar{\chi} = \chi / \delta$$

Уравнение (7) хорошо известно в литературе как нелинейное уравнение теплопроводности. В нашем случае оно описывает процесс фильтрации воды (отжатие воды из слоя под действием постоянной нагрузки) в агрегированной пористой среде с набухающим скелетом. Известны его точные и автомодельные решения (Полянин и др., 1998). Далее полученное уравнение решалось численно по соответствующей разностной схеме, предложенной в (Самарский, 1989).

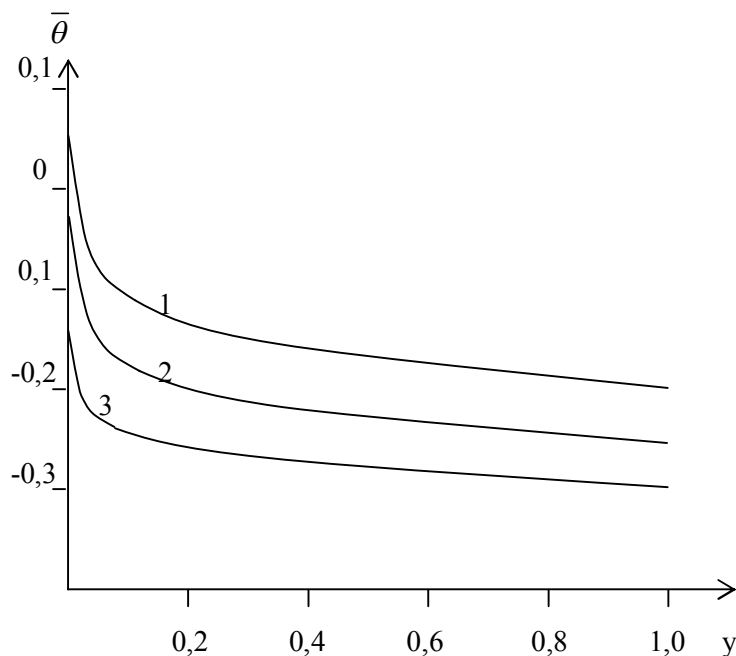


Рис.1. Распределение усадки по слою (1 – в начале процесса, 2 – в некоторый промежуточный момент, 3 – в конечный момент времени).

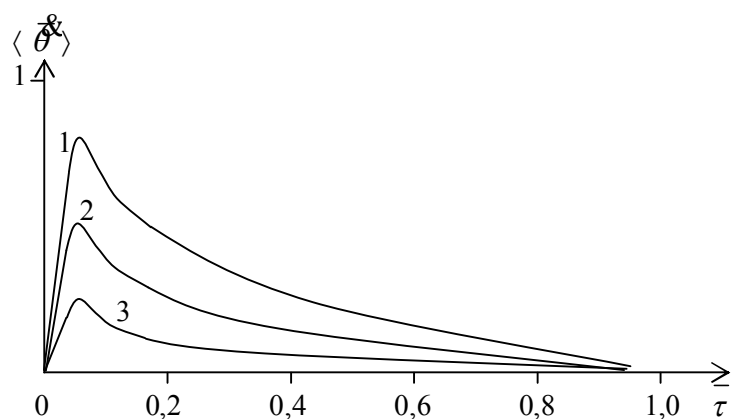


Рис. 2. Графики зависимости средней по слою скорости деформации от времени, при разных значениях параметра δ (1 – $\delta = 1 \cdot 10^{-2}$, 2 – $\delta = 7 \cdot 10^{-3}$, 3 – $\delta = 2 \cdot 10^{-3}$).

Второй параграф второй главы посвящен реологическим следствиям решения задачи о деформации набухающего слоя под постоянной внешней нагрузкой. Используются результаты первого параграфа, связывающие основные параметры набухающих систем с приложенной к ним механической нагрузкой. Рассматриваются ситуации, когда приложенная механическая нагрузка приводит к специфической зависимости скорости усадки от приложенной нагрузки.

Третий параграф второй главы посвящен собственно анализу решения задачи о набухании/усадке набухающего слоя под нагрузкой. Рассматриваются зависимости, характеризующие протекание процесса усадки в различных условиях. Получены зависимости для основных характеристик процесса.

В четвертом параграфе второй главы проводится сравнение полученных зависимостей с экспериментальными данными. Можно отметить хорошее согласие зависимостей, полученных расчетным путем, с соответствующими зависимостями, полученными в ходе экспериментов.

Третья глава посвящена разработке модели водоотдачи набухающего слабопроницаемого слоя в эксплуатируемый водоносный пласт. Задача является традиционной для гидрогеологии (схема Хантуша). Ее решение представляется важным с точки зрения вопроса о длительности эксплуатации водоносного

пласта. Дело в том, что решение данной задачи традиционным способом по схеме Хантуша приводит к меньшему времени эксплуатации водоносного пласта. Учет нелинейных свойств деформирования природных набухающих сред, в данном случае – глинистых водоупоров, дает возможность прогнозировать эксплуатацию пласта в течение большего интервала времени.

В первом параграфе третьей главы рассматривается задача о фильтрации в водоносном пласте с перетоками из перекрывающего основной пласт слабопроницаемого глинистого набухающего слоя.

Во втором параграфе третьей главы рассмотрен процесс отжатия воды из нелинейно деформирующегося набухающего глинистого слоя в водоносный пласт, вскрытый совершенной скважиной.

В третьем параграфе третьей главы рассматриваются основные зависимости, характеризующие данный процесс. Показано, что учет эффекта нелинейного деформирования природной набухающей среды (в данном случае – глинистой породы) сказывается на изменении вида основных характеристик процесса (распределения давления в пласте, усадки и др.).

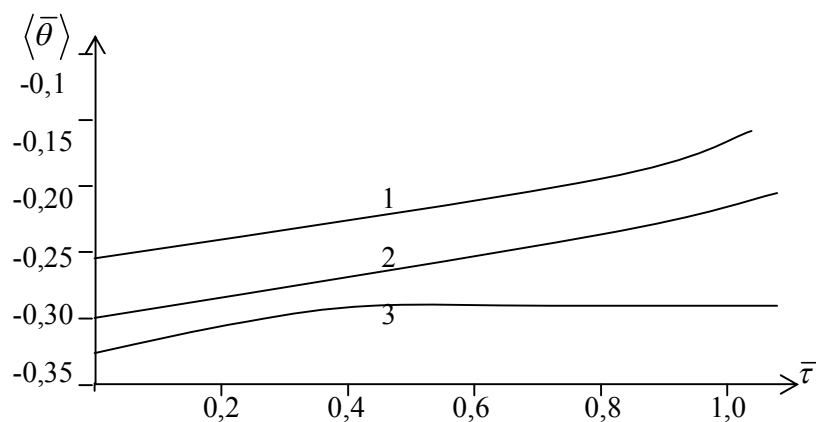


Рис. 3. График зависимости средней усадки от радиуса (1 – в начале процесса, 2 – в некоторый промежуточный момент, 3 – в конечный момент времени).

Четвертая глава диссертации посвящена вопросам моделирования, связанным с процессом закачки в водоносный пласт загрязненных растворов (подземное захоронение загрязнений).

Первый параграф четвертой главы посвящен получению уравнений массопереноса в пласте, перекрытом слабопроницаемым глинистым слоем, при закачке в пласт раствора, содержащего загрязняющую примесь.

Во втором параграфе четвертой главы приведена реализация модели массообмена между пластом и слабопроницаемым набухающим глинистым слоем. Полученные данные качественно согласуются с основными характеристиками такого процесса, выявленными экспериментально, а также позволяют оценить влияние загрязнения на сам процесс формирования этих характеристик.

В третьем параграфе четвертой главы рассмотрены основные характеристики численного решения задачи и проведен их анализ. Показано, что учет нелинейных эффектов массопереноса в природных набухающих средах проявляется в количестве загрязнения, задержанного глинистым слоем. Это, в свою очередь, сказывается на виде зависимостей, характеризующих изолирующие (буферные) свойства глинистых водоупоров. Проанализировано влияние нелинейных свойств уравнений массопереноса в природных набухающих средах на усадку глин при закачке загрязнений. Даны некоторые рекомендации для предотвращения избыточного растрескивания глин, что неблагоприятно сказывается на изолирующих возможностях глинистых водоупоров.

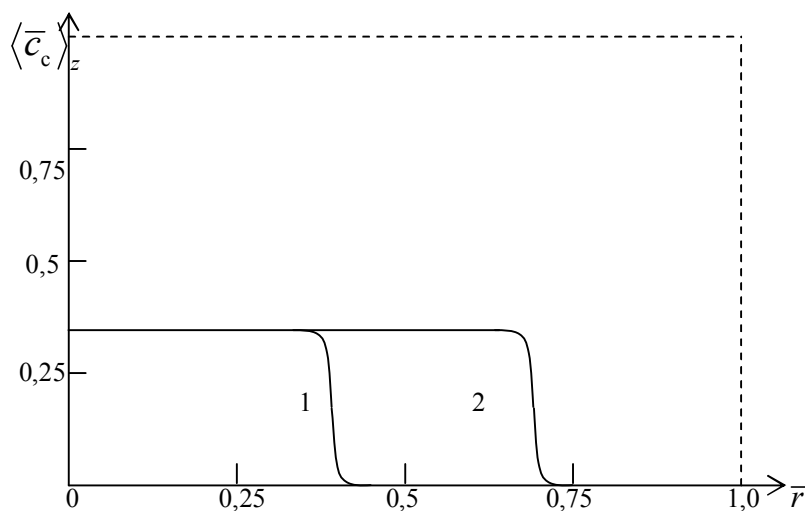


Рис. 4. Зависимость концентрации примеси в глинe от радиуса:
1 – профиль концентрации для $\tau = 0,5\tau_{st}$;
2 – профиль концентрации для $\tau = \tau_{st}$, где τ_{st} – конечный момент времени.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе:

1. На основе методов термодинамики набухающих систем разработаны модели массопереноса в природных набухающих средах и в рамках этих моделей исследовано влияние различных факторов на физико-механические и физико-химические характеристики этих сред.
2. На основе разработанных моделей решена задача об отборе воды из водоносного пласта, перекрытого взаимодействующим с ним слабопроницаемым набухающим глинистым слоем. Решение этой задачи представляет большой практический интерес для прогноза длительной эксплуатации водозаборных скважин водоносных пластов.
3. На базе методов теории массопереноса в набухающих средах разработана модель процесса закачки в пласт, перекрытый набухающим глинистым слоем, раствора, содержащего загрязняющие природную среду компоненты (задача о подземном захоронении жидких загрязнений).

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Плещинский Н.Б. Теоретические основы реологии набухающих грунтов и сред /Н. Б. Плещинский, М. Г. Храмченков, Э. М. Храмченков //Тезисы международного семинара «Супервычисления и математическое моделирование». – Саров, 2004. – С. 71.
2. Плещинский Н.Б. Теоретические основы реологии набухающих грунтов / Н. Б. Плещинский, М. Г. Храмченков, Э. М. Храмченков // Тезисы XI Толстихинских чтений.– С.Петербург, 2004. – С. 45.
3. Плещинский Н.Б. Математическое моделирование реологии набухающих систем / Н. Б. Плещинский, М. Г. Храмченков, Э. М. Храмченков // Инженерно-физический журнал. – 2005. – Т. 78. – №6. – С. 93 – 99.
4. Плещинский Н.Б. Реология пористых сред с набухающим скелетом и некоторые задачи инженерной геодинамики /Н. Б. Плещинский, М. Г. Храмченков, Э. М. Храмченков //Труды Международной научной конференции «Проблемы инженерной геодинамики и экологической геодинамики». – Москва, 2006. – С. 109 – 110.
5. Плещинский Н.Б. Модель притока воды к совершенной скважине с учетом водоотдачи лежащего выше глинистого слоя / Н. Б. Плещинский, М. Г. Храмченков, Э. М. Храмченков // Инженерно-физический журнал. – 2007. – Т. 80. – №3. – С. 81 – 85.
6. Храмченков Э. М. О реологии набухающих систем // Труды математического центра им. Н. И. Лобачевского. Т. 29. – Казань; Казанское матем. об-во, 2004. – С. 22 – 34.
7. Храмченков Э. М. Реология набухающих систем // Труды итоговой научно-образовательной конференции студентов КГУ, 2004. – С. 72.
8. Храмченков Э. М. Реология пористых сред с набухающим скелетом и некоторые задачи инженерной геодинамики // Труды математического центра им. Н. И. Лобачевского. Т. 32. – Казань; Казанское матем. об-во, 2005. – С. 131 – 137.
9. Khramchenkov M.G. Physico-chemical mechanics of clay's swelling / M.G. Khramchenkov, E.M. Khramchenkov, N.B. Pleshchinskii // Book of Abstracts, 17-th Conf. on Clay Mineralogy and Petrology, Prague, 2004, – P. 27.

10. Khramchenkov M.G. Physico-chemical mechanics of clay swelling / Khramchenkov, E.M. Khramchenkov, N.B. Pleshchinskii // Acta Geodyn. Geomater. – Vol.2. – No.2 (138). – 2005. – P.47-52.
11. Khramchenkov E.M. Numerical simulation of swelling process // Proc. of International School on Advanced Plasma and Thin Film Technology for Commercialization with ISTC, Suvon, Korea, 2007. – P. 2 – 3.