

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра информатики и программирования

**Математическое моделирование движения слабоконцентрированной
суспензии с изменяющимися параметрами в пористой среде**

АВТОРЕФЕРАТ

НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

аспиранта 3 курса

направления 02.06.01 «Компьютерные и информационные науки»

направленности «Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ»

Булавиной Екатерины Викторовны

Научный руководитель,
профессор кафедры ИиП, д. т.н.



А.С. Фалькович

Зав. кафедрой ИиП,
доцент, к.ф.-м.н.



М. В. Огнева

Саратов, 2020

Общая характеристика темы

Актуальность темы

Течение жидкости в пористых средах, или фильтрация, – один из самых распространенных процессов в природе, технике и технологиях. Пористая среда – это почвы, грунты, горные породы, строительные и другие искусственные материалы, частицы которых неплотно прилегают друг к другу, образуя связанные между собой пустоты, через которые может перемещаться жидкость или газ. Во многих случаях жидкость в порах может содержать в себе взвесь твердых мелкодисперсных частиц. Такая взвесь твердых мелкодисперсных частиц в жидкости, которая движется вместе с частицами как сплошная среда, называется суспензией. Суспензию можно рассматривать как вязко-пластичную жидкость, то есть среду, обладающую небольшим начальным (предельным) градиентом. Движение суспензии начинается тогда, когда приложенный градиент давления превысит некоторое начальное значение.

При движении влаги в почве в некоторых случаях частицы почвы по причине изменения химического состава влаги и твердой фазы попадают в поровую влагу и перемещаются вместе с ней. Таким образом, возникает задача о движении слабоконцентрированной суспензии. При этом в жидкости меняется концентрация частиц, и, следовательно, вязкость и предельный градиент суспензии.

От этого зависят многие характеристики почвы: формирование почвенного профиля, интенсивность протекающих в ней биологических, химических и физико-химических процессов, водно-воздушный, питательный и тепловой режимы, ее физико-механические свойства, то есть, важнейшие показатели почвенного плодородия.

Целью данной работы является изучение движения слабоконцентрированной суспензии в пористой среде при увеличении количества дисперсных частиц.

Научная новизна:

- Построена модель движения слабоконцентрированной суспензии в пористой среде и показана ее применимость;
- Разработан метод численного решения квазилинейного уравнения в частных производных с подвижной границей;
- Разработан метод оценки реологических параметров слабоконцентрированной суспензии

Теоретическая значимость: представленные в работе результаты могут быть применены в задачах математического моделирования движения двухфазной смеси с переменными реологическими свойствами в пористой среде.

Практическая значимость: рассматриваемые модели могут использоваться для решения задач математического моделирования в геологии, гидрогеологии и физике почв. носит теоретический характер.

Выносимые на защиту результаты:

1. Разработана математическая модель движения слабоконцентрированной суспензии в пористой среде. Выведено и исследовано уравнение движения жидкости с взвешенными в ней мелкодисперсными частицами в пористой среде на основе модели фильтрации вязко-пластичной жидкости с переменными вязкостью и начальным градиентом с учетом кинетики выноса частиц в поровое пространство

2. Разработан метод решения квазилинейного дифференциального уравнения с подвижной границей

3. Разработан и реализован алгоритм численного решения уравнения движения слабоконцентрированной суспензии

4. Реализован эффективный численный метод в виде комплекса проблемно-ориентированных программ на высокоуровневом языке программирования Python для проведения вычислительного эксперимента

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих научных семинарах и конференциях:

– научные семинары кафедры информатики и программирования (2017–2020 г.),

– Международная научная конференция «Компьютерные науки и информационные технологии» (2018 г., СГУ, Саратов).

- XX международная конференция «Современные проблемы механики сплошной среды» // (2020 г., Ростов-на-Дону.)

Структура и объем работы. Работа состоит из введения, трех глав, заключения, списка использованной литературы (20 источников), 1 приложения.

Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность выбранной темы, характеризуется степень ее разработанности, определяются цели и задачи, новизна исследования.

В первой главе описывается постановка задачи. Приведены соображения, обуславливающие актуальность и практическую значимость разработки математических моделей для исследования зависимостей движения жидкости в пористой среде. Описываются основные принципы моделирования, о распределении илистых частиц в почвенном профиле. Рассматривается процесс измерения гидравлической проводимости грунта и его изменений. Влияние плотности сложения и содержания глины на гидравлическую проводимость оценивали с использованием почвы Фоллбрукс. На основе физических и химических свойств почвы изучаются реологические зависимости.: концентрация взвешенной глины в фильтрате, образующемся при промывке чистой водой образца глины Фоллбрукс. Разрабатывается модель перемещения илистых частиц в почве, кроме проницаемости (вычисляемой на основе коэффициента фильтрации) и пористости, содержит эмпирические параметры ω , α_1 и α_2 . Описывается процесс движения слабokonцентрированной суспензии в пористой среде при увеличении количества дисперсных частиц на основе систем уравнений, в которую входят вязкость и начальный градиент, зависящие от плотности слабokonцентрированной суспензии в данной точке и в

данный момент времени. Полученные решения можно использовать для имитационных экспериментов и для определения эмпирических параметров ω , α_1 и α_2 , описывающих реологические свойства слабоконцентрированной суспензии.

Во второй главе рассматриваются методы построения разностных схем. Для увеличения эффективности вычислений можно использовать одновременную аппроксимацию двух (или более) вычислительных блоков. Например, если нужно численно функцию и продифференцировать и переинтерполировать на другую сетку. Или решить дифференциальное уравнение, в котором правая часть – производная известной функции.

Построение разностных схем осуществляется с учетом ряда требований, предъявляемых к разностной схеме. Необходимо, чтобы разностная схема удовлетворяла следующим условиям:

- 1) аппроксимировала с более высоким порядком исходную дифференциальную задачу;
- 2) была устойчивой;
- 3) обладала свойством консервативности, т.е., чтобы на сетке выполнялись разностные аналоги законов сохранения;
- 4) была экономичной;
- 5) была легко разрешимой и т.д.

Приводятся шаблоны схем явной и неявной для уравнений теплопроводности.

В третьей главе описывается вычислительный эксперимент. Подробно рассматривается математическая модель движения и значения физических параметров и характеристик образца для расчетов.

Геометрические параметры образца приведены в работе [6]. Так, на странице 33 приведена длина образца $L = 27$ см, на странице 35 поровый объем $M_p = 250$ мл. Рассчитаем объем образца по данным плотности сложения $r_1 = 1,68$ г/см³ и плотности твердой фазы $r_2 = 2,7$ г/см³.

Пористость m вычисляем по формуле

$$m = \frac{r_2 - r_1}{r_2} = 0,37778$$

Отсюда объем образца M

$$M = \frac{M_p}{m} = 661,76 \text{ см}^3$$

и площадь поперечного сечения S

$$S = \frac{M}{L} = 24,5$$

Радиус $R = 2,793$.

Вязкость воды $\mu = 8,90 \cdot 10^{-4} \text{ Па} \cdot \text{с} = 8,90 \cdot 10^{-4} \text{ кг}/(\text{м} \cdot \text{с})$ при 25°C и плотность воды $\rho = 1000 \text{ кг}/\text{м}^3$ взяты из [12].

Данные о скорости фильтрации, коэффициенте фильтрации и проницаемости образца почвы Fallbrook с характеристиками: плотность сложения $1,68 \text{ г}/\text{см}^3$, содержание ила 10% , ESP (процент поглощенного натрия) 10% - были получены путем оцифровки рисунка 2 из работы [6].

Объем фильтрата V в момент времени t выражается формулой

$$V(t) = S \int_0^t u(t) dt \quad (4)$$

Поскольку в обозначениях работы [6]

$$u(t) = -K(t) \frac{dH}{dx}$$

где $K(t), \frac{\text{м}}{\text{с}}$ – коэффициент фильтрации,

$H, \text{ м}$ – гидравлический напор,

формула (4) принимает вид

$$V(t) = -S \frac{dH}{dx} \int_0^t K(t) dt$$

Для отыскания зависимости $K = K(t)$ продифференцируем это выражение по t

Чтобы найти зависимость $K = K(t)$, вычислим производные

$$\frac{\partial K}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial t}$$

$$\frac{\partial K}{\partial V}$$

Производную $\frac{\partial K}{\partial V}$ определим численно, путем оцифровки графика на рисунке 1.

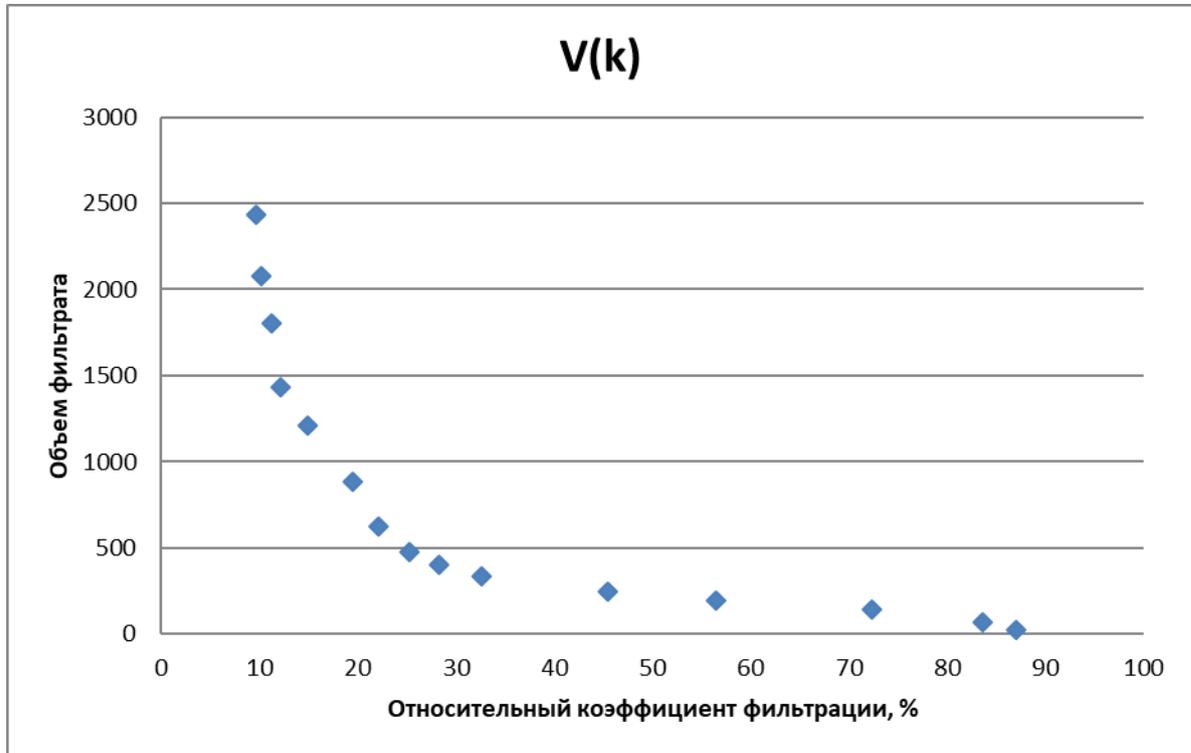


Рисунок 1. Зависимость объема фильтрата от относительных значений коэффициента фильтрации по результатам оцифровки данных работы Frenkel H. Goertzen J., Rhoades J. D. Effect of clay type and content, exchangeable sodium percentage and electrolyte concentration on clay dispersion and soil hydraulic conductivity // Soil Sci. Soc. Amer. J. 1978. – V. 42. – N. 1. – P. 32-39.

Производная

$$\frac{\partial V}{\partial t} = -S \frac{dH}{dx} [K(t) - K_0] = S \frac{dH}{dx} [K_0 - K(t)]$$

С другой стороны,

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial K} \frac{\partial K}{\partial t}$$

Отсюда получаем выражение для

$$\frac{\partial K}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial V} S \frac{dH}{dx} [K_0 - K(t)]$$

или для

$$\frac{\partial t}{\partial K} = \frac{\partial V}{\partial K} \frac{1}{S \frac{dH}{dx} [K_0 - K(t)]}$$

Из последнего выражения получаем формулу для (5)

$$t(K) = \frac{1}{S \frac{dH}{dx}} \int_{K_0}^{K(t)} \frac{\partial V}{\partial K} \frac{1}{[K_0 - K(t)]} dK$$

Численные значения подинтегрального выражения приведены в таблице 1.

Таблица 1 Численное подинтегральное выражение

Объем фильтрата (V)	Относительный коэффициент фильтрации (Krel)	dV/dk	1/(K(t)-K0)	Подинтегральное выражение
0	100	-1,68448	-0,0769	0,129531
22	87	-1,68448	-0,0769	0,129531
68	84	-13,5399	-0,06082	0,823474
140	72	-6,35049	-0,03616	0,229648
192	57	-3,28355	-0,02299	0,075488
244	45	-4,70346	-0,01833	0,086209
334	33	-7,02928	-0,01483	0,10427
403	28	-15,792	-0,01394	0,220101
476	25	-24,7303	-0,01338	0,330891
624	22	-47,1053	-0,01284	0,604865
884	19	-96,6822	-0,01241	1,200007
1208	15	-72,0537	-0,01176	0,847169
1435	12	-80,0239	-0,01138	0,910476
1804	11	-412,171	-0,01126	4,642133
2078	10	-261,696	-0,01113	2,913057
2432	10	-787,705	-0,01108	8,72475

Пользуясь этими выражениями, можно найти зависимости объема фильтрата V от времени t или времени от объема фильтрата, а также зависимость коэффициента фильтрации от времени $K(t)$. Для этого, однако, необходимо знать начальное значение коэффициента фильтрации K_0 .

Коэффициент фильтрации K_0 для легкого и среднего суглинка согласно методическим рекомендациям [] может изменяться в широких пределах – от 0,4 до 0,005 м/сут, что составляет $4,63 \cdot 10^{-06} - 5,79 \cdot 10^{-08}$ м/с.

Соответственно, с учетом приведенных выше значений вязкости и плотности воды проницаемость k

$$k = K \cdot \frac{\mu}{\rho g}$$

и составляет от $4,20 \cdot 10^{-13}$ до $5,26 \cdot 10^{-15}$ м², или от 0,420 до 0,00526 дарси.

Приводится программа по реализации на языке программирования Python эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплекса проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

Для вычисления сетки по координате $x[i]$ используем цикл от 1 до $N+1$ с шагом dx , с помощью которого вычисляем количество точек по x

for i in range(N+1):

$$x[i]=x[i]*dx$$

Значение нового слоя

$$ro - [0]*N$$

$$mu - [0]*N$$

$$gamma - [0]*N$$

$$a - [0]*N$$

$$P =[0]*N$$

$$dPdx =[0]*N$$

for i in range(N):

ro[i] - *row* присваиваем значение плотности воды

mu[i] - *muw* присваиваем 8.90e-4 вязкость воды

gamma[i] - *gammaaw* присваиваем 0.01 начальный градиент воды

В качестве начального значения присваиваем значение ноль, для вычисления параметров источника $a[i] = 0$, $Tx = [0]*N$;

$Tx[i] = 0$

$P[i] = (L + \Delta H) * row * g$

$dPdx[i] = \Delta H * row * g * dx / L$

Таким образом, получаем значение старого слоя:

$ro_1 = [0]*N$,

$mu_1 = [0]*N$,

$u_1 = [0]*N$,

$P_1 = [0]*N$,

$dPdx_1 = [0]*N$,

$a_1 = [0]*N$

$gamma_1 = [0]*N$

$u_1 = u$

Переходим к расчетам очередного слоя по времени

while t <= 256000:

$t = t + dt$

$outt = outt + dt$

В зависимости от изменения времени происходит формирования нового слоя.

При формировании старого слой из нового используем прохождение по циклу до N – количество точек по x :

for i in range(N):

$$ro_1[i] = ro[i]$$

$$mu_1[i] = mu[i]$$

$$gamma_1[i] = gamma[i]$$

$$a_1[i] = 0$$

$$P_1[i] = P[i]$$

$$dPdx_1[i] = dPdx[i]$$

$$xf = xf + u*dt$$

Формируем время дохождения фронта до точки с координатой $dx \cdot i$ $T_x[i]$ время дохождения до нижнего L (Длина образца), если длина образца больше значения сетки по координате, тогда следующим условие проверяется условие с $x[iii]$

if $xf \leq L$:

if $xf \geq x[iii]$:

$T_x[iii] = t$

$iii = iii + 1$

for i in range(N):

if $T_x[i] \geq t$:

$a[i] = 0$

else:

$a[i] = a_0 * \mathit{math.exp}(\omega * (T_x[i] - t))$

Граничные условия на новом слое

$$ro[0] = row$$

$$mu[0] = mu_w$$

$$\text{gamma}[0] = \text{gammaw}$$

$$dPdx[0] = \text{deltaH} * \text{row} * g * dx / L$$

$$\text{znam} = 0$$

Вычисление плотности воды:

foriinrange(1, N):

$$\text{ro}[i] = \text{ro_1}[i] * (m / dt) - 0.5 * u_1 * (\text{ro_1}[i] - \text{ro_1}[i - 1]) / dx + 0.5 * u_1 * \text{ro}[i - 1] / dx$$

$$\text{ro}[i] = (\text{ro}[i] + \text{omega} * a[i - 1]) / (0.5 * u_1 / dx + m / dt)$$

$$\text{mu}[i] = \text{muw} * (1.0 + \text{alpha1} * (\text{ro_1}[i] - \text{row}))$$

$$\text{gamma}[i] = \text{gammaw} * (1 + \text{alpha2} * (\text{ro}[i] - \text{row}))$$

$$dPdx[i] = + \text{mu}[i] * u_1 / k - 0.5 * u_1 ** 2 * (\text{ro}[i] - \text{ro}[i - 1]) / dx - \text{ro}[i] * g + g * i * dx * (\text{ro}[i] - \text{ro}[i - 1]) / dx - \text{gamma}[i]$$

$$\text{znam} = \text{znam} + 1 / (k / \text{mu}[i] * (-0.5 * u_1 ** 2 * (\text{ro}[i] - \text{ro}[i - 1]) / dx + \text{ro}[i] * g + g * i * dx * (\text{ro}[i] - \text{ro}[i - 1]) / dx - \text{gamma}[i]))$$

$$u = 1 / \text{znam}$$

Заключение

Представленные в работе результаты могут быть применены в задачах математического моделирования движения двухфазной смеси с переменными реологическими свойствами в пористой среде.

Рассмотренные модели могут использоваться для решения задач математического моделирования в геологии, гидрогеологии и физике почв, носит теоретический характер.

В ходе выполнения научно-исследовательской работы были выполнены следующие задачи:

1. Выведены и исследованы уравнения движения жидкости с взвешенными в ней мелкодисперсными частицами в пористой среде на основе модели фильтрации вязко-пластичной жидкости с переменными вязкостью и начальным градиентом.

2. Исследованы методы решения квазилинейного дифференциального уравнения с подвижной границей.

3. Реализованы алгоритмы для численного решения уравнений движения слабоконцентрированной суспензии.

4. С помощью высокоуровневого языка программирования Python представлена реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплекса проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.

5. Разработан метод оценки реологических параметров слабоконцентрированной суспензии

Работы, опубликованные автором по указанной теме

1. Булавина Е.В., Фалькович А.С., Equations of the transport of fine particles suspension with variable concentration in a porous medium a suspension// Представляем научные достижения миру. Естественные науки Материалы IX научной конференции молодых ученых. Саратов, 2019. С. 29-33
2. Булавина Е.В., Фалькович А.С. Численное моделирование движения слабоконцентрированной суспензии в пористой среде// Материалы Международной научной конференции "Компьютерные науки и информационные технологии" памяти А.М.Богомолова. Саратов: Издат.центр «Наука», 2018. – с.414-416
3. Булавина Е. В., Фалькович А. С. Оценка реологических свойств слабоконцентрированной суспензии на основе вычислительного эксперимента . Современные проблемы механики сплошной среды // тезисы докладов XX международной конференции. Ростов-на-Дону – Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2020. С. 28