

# Развитие гибридного подхода для описания процессов разрушения и массопереноса в контрастных средах

А.В. ДИМАКИ

*Институт физики прочности и материаловедения, Томск, Россия*

e-mail: dav@ispms.tsc.ru

А.И. ДМИТРИЕВ

С. ЗАВШЕК

*Velenje Coal Mine, Velenje, Slovenia*

С.Г. ПСАХЬЕ

Для численного моделирования контрастных сред авторами предложен гибридный подход, представляющий собой комбинацию метода подвижных клеточных автоматов (МСА) и метода классических клеточных автоматов (ССА). На слое МСА моделируются движение твердого каркаса, а также процессы его разрушения путем решения уравнений движения подвижных клеточных автоматов под влиянием механической нагрузки. На слое ССА для газовой фазы решаются уравнение фильтрации в открытых порах и каналах, а также уравнение диффузии в твердом каркасе. Временной шаг модели делится на два подшага, на первом из которых происходит решение уравнений метода МСА, а на втором - метода ССА. Развитый подход апробирован на тестовых задачах адсорбции газа в образцах угля. Модельные условия соответствовали условиям натуральных экспериментов, проводимых в Университете Любляны, Словения. Выявлено качественное согласие между экспериментальными данными и результатами моделирования.

Многофазные гетерогенные среды, к которым относятся композитные пористые материалы, геологические среды, каталитические химические реакторы и т.д., включают в себя как твердофазные компоненты, так и компоненты, находящиеся в жидком и газообразном состоянии. В настоящее время наблюдается бурное развитие методов численного моделирования таких сред. Одним из перспективных с этой точки зрения методов является предложенный авторами проекта метод гибридных клеточных автоматов.

Метод гибридных клеточных автоматов представляет собой комбинацию методов классических и подвижных клеточных автоматов [1]. В рамках данного метода исследуемая среда рассматривается как совокупность (суперпозиция) двух взаимосвязанных сред, одна из которых представлена ансамблем подвижных клеточных автоматов, а другая - сеткой, образованной классическими клеточными автоматами (Рис. 1а). В рамках метода гибридных клеточных автоматов расчетный шаг разбивается на два "внутренних" шага. Первый из них называется "механическим" и представляет собой шаг, выполняемый на слое подвижных клеточных автоматов. На этом этапе решаются уравнения движения подвижных автоматов, моделируются процессы разрушения и массопереноса в твердом каркасе под воздействием механических нагрузок. Согласно [1], подвижный клеточный автомат представляет собой объект конечного размера, обладающий трансляционной и ротационной степенями свободы. Взаимодействие между автоматами определяется нормальной (действующей вдоль линии, соединяющей центры масс автоматов) и тангенциальной силами, каждая из которых является суммой соответствующих потенциальной и диссипативной компонент. В рамках метода МСА используется многочастичное взаимодействие.

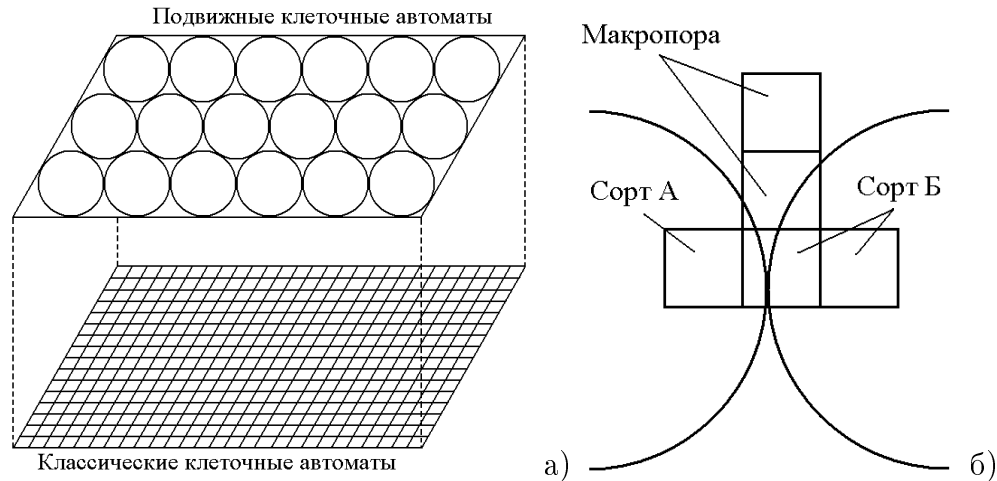


Рис. 1. а) Слои подвижных и классических клеточных автоматов; б) Определение сорта классического клеточного автомата.

Для моделирования процессов разрушения в методе МСА введено два типа состояния пары автоматов – связанная и несвязанная. Введение нового типа состояния потребовало определения критерия переключения межавтоматной связи – параметра перекрытия автоматов:  $h_{ij} = r_{ij} - r_{oij}$ . Здесь  $r_{ij}$  – начальное расстояние между центрами соседствующих частиц, а  $r_{oij} = (d_i + d_j) / 2$ , где  $d_{i(j)}$  размер подвижного автомата. В простейшем случае переход из связанного состояния в несвязанное происходит при превышении параметром перекрытия некоторого предельного значения  $h_{ij}^{max}$ . Связанное состояние означает наличие химической связи между частицами, несвязанное – отсутствие химической связи (частицы механически разделены). Переход по некоторому условию из несвязанного состояния в связанное позволяет описывать процесс залечивания трещин и пор. Более подробно формализм метода подвижных клеточных автоматов изложен в работе [1].

За механическим шагом следует ”сеточный шаг”, который выполняется на сетке классических клеточных автоматов. На данном этапе моделируются процессы переноса газа в порах и каналах твердого каркаса. На основе рассчитанных значений концентраций газа в порах вычисляется давление, действующее на твердый каркас со стороны газовой фазы. Геометрия макроскопических пор (имеющих размер, сопоставимый с размером подвижного автомата) проецируется на сетку классических клеточных автоматов со слоя МСА, как показано на рис. 1б. Указанный подход позволяет объединить решения механической и газодинамической задачи и описать поведение многофазной гетерогенной среды. Необходимо отметить, что точность метода зависит от соотношения между размерами классического и подвижного автоматов. Чем меньше данное соотношение, тем больше точность как описания формы и размеров макропор, так и ”проецирования” свойств со слоя МСА на слой ССА и обратно.

В рамках описанного в работе подхода газ полагается идеальным (подчиняющимся закону Менделеева-Клапейрона):

$$PV = N_{\mu}RT, \quad (1)$$

где  $P$  – давление газа,  $N_{\mu}$  – количество молей газа в объеме  $V$ ,  $T$  – температура газа. Температура газа в системе считается постоянной и равной температуре твердого каркаса. Такое приближение распространено при моделировании газонесущих пластов.

Если в системе присутствует несколько газов, суммарное давление в ячейке вычисляется как сумма парциальных давлений каждого газа.

По характеру протекания газообмена между поровым пространством твердой фазы и окружающей средой можно выделить два вида пористости: 1) открытая пористость, представляющая собой совокупность связанных между собой каналов и несплошностей, имеющих выходы на поверхность материала; и 2) закрытая пористость, образованная изолированными друг от друга и от внешнего пространства пора́ми микро- и наноскопических размеров. В рамках указанного допущения о присутствующих в среде видах пористости, которое в целом соответствует имеющимся экспериментальным данным, целесообразно предположить существование как минимум двух механизмов газообмена: 1) фильтрация газа в каналах, образующих открытую пористость; и 2) диффузионный перенос газа между полостями открытой и закрытой пористости через стенку твердого каркаса [3].

Фильтрация идеального газа в каналах, сечение которых превышает длину свободного пробега молекул газа, происходит в режиме пуазейлевского течения вязкого газа и может быть описана законом Дарси с учетом сжимаемости газа:

$$\gamma \frac{\delta \rho}{\delta t} = \frac{\delta}{\delta x} \left( \frac{k}{\eta} P \frac{\delta P}{\delta x} \right), \quad (2)$$

где  $\rho$  – плотность газа,  $\gamma$  – открытая пористость,  $k$  – проницаемость среды,  $\eta$  – динамическая вязкость газа.

Диффузионный перенос газа между открытой и закрытой пористостью считается подчиняющимся закону Фика. Предполагая, что средний размер монолитного блока среды (иными словами, среднее расстояние между каналами открытой пористости) составляет  $R$ , уравнение диффузии может быть записано следующим образом:

$$\gamma_0 \frac{\delta \rho}{\delta t} = \frac{3}{R} \frac{D}{(\pi (1 - \gamma - \gamma_0/\nu))^{0.5}} \frac{\delta^2 \rho}{\delta t^2}, \quad (3)$$

где  $\gamma_0$  – закрытая пористость,  $\nu$  – коэффициент растворимости газа в материале твердого каркаса.

Наличие газов в окружающем твердофазные компоненты пространстве (макропорах), а также в объеме материала (в закрытых порах, моделируемых неявно), приводит к возникновению дополнительных сил, действующих на поверхность твердого тела и вызывающих рост внутренних напряжений в каркасе. В работе предложен следующий способ учета влияния давления газов в "макропорах" на отклик подвижных клеточных автоматов, моделирующих твердофазные компоненты системы "твердое тело - газ". В простейшем приближении полагается, что поскольку давление окружающего газа на поверхность (или часть поверхности) подвижного автомата приложено по нормали к ней, оно вызывает только трансляционное движение. В этом случае уравнение, описывающее трансляционную динамику подвижных клеточных автоматов, можно записать в виде:

$$\frac{d^2 \mathbf{R}_k}{dt^2} = \frac{1}{m_k} \left[ \sum_l (\mathbf{F}_{norm}^{kl} + \mathbf{F}_{tan}^{kl}) + \mathbf{F}_k^{gas} \right], \quad (4)$$

Здесь  $k$  и  $l$  – номера подвижных клеточных автоматов,  $\mathbf{F}_k^{gas}$  – суммарная сила со стороны окружающих автомат газов, приложенная к его центру масс:

$$\mathbf{F}_k^{gas} = S \sum_{a=1}^{N_k^{surf}} \sum_{b=1}^{N_a^{gas}} P_b \mathbf{n}_{ba}, \quad (5)$$

где индекс  $a$  нумерует "поверхностные" классические клеточные автоматы, которые "принадлежат"  $k$ -му подвижному автомату, ( $N_k^{surf}$  – количество таких автоматов), индекс  $b$  нумерует классические автоматы, которые граничат с поверхностью  $a$ -го подвижного автомата и принадлежат макропорам ( $N_a^{gas}$  – количество таких автоматов; в случае квадратной упаковки  $N_a^{gas} \leq 3$ ),  $P_b$  – давление газа в объеме клеточного автомата  $b$ ;  $\mathbf{n}_{ba}$  – единичный вектор, ориентированный нормально к плоскости контакта автоматов  $b$  и  $a$ , в направлении автомата  $a$ ,  $S$  – "площадь контакта" классического автомата.

Кроме того, давление газа со стороны макропор и "микропор" (внутреннее давление) приводит к изменению напряженного состояния подвижных клеточных автоматов. В рамках формализма расчета потенциального взаимодействия подвижных клеточных автоматов такое влияние можно учесть путем модификации выражения для среднего напряжения  $k$ -го автомата в паре с  $l$ -м подвижным автоматом:

$$\begin{cases} \sigma_y^{kl} = \sigma_{kl} \\ \sigma_x^{kl} = \frac{\sum_{m \neq l} \sigma_{km} |\cos(\alpha_{kl,km})|}{T_x} - \frac{S \sum_{a=1}^{N_k^{surf}} \sum_{b=1}^{N_a^{gas}} P_b \mathbf{n}_{ba} |\cos(\beta_{kl,\mathbf{n}_{ba}})|}{T_x S_0^{kl}} \\ \sigma_{mean}^{kl} = \frac{\sigma_x^{kl} + \sigma_y^{kl}}{3} + P_{gas}^k \end{cases} \quad (6)$$

Второй член в правой части выражения для  $\sigma_x^{kl}$  описывает вклад давления со стороны макропор, а член  $P_{gas}^k$  в выражении  $\sigma_{mean}^{kl}$  – вклад давления газа во внутренних порах  $k$ -го подвижного автомата. В простейшем случае, полагая величину пористости малой, а характерный размер пор много меньшим расстояния между ними, линейное приближение значения  $P_{gas}^k$  может быть определено следующим образом:

$$P_{gas}^k = P_{pores}^k (\gamma + \gamma_0), \quad (7)$$

где  $P_{pores}^k$  – поровое давление в  $k$ -м подвижном автомате.

Развитая модель была апробирована на простейшей тестовой задаче описания процесса сорбирования углекислого газа образцом бурого угля, предварительно измельченного и дегазированного. Структура модельного образца показана на рис. 2. Данная задача была выбрана для тестирования модели ввиду наличия экспериментальных данных по зависимости давления в сосуде от времени, полученных сотрудниками Веленской угольной шахты (г. Веленье, Словения) и факультета Естественных и инженерных наук Университета Любляны (г. Любляна, Словения). В эксперименте сосуд, содержащий образец угля, заполнялся углекислым газом до давления 56 атм в течение 5-7 сек. Затем наблюдалось падение давления в сосуде, обусловленное процессом сорбции газа в угле. Малое, по сравнению с характерными временами сорбции, время достижения рабочего давления позволяет не рассматривать этап заполнения сосуда при моделировании. Параметры пористости модельного образца были заданы на основании данных микроскопического исследования углей [4]. На рис. 3 показаны экспериментальная и модельная зависимости давления газа в сосуде от времени. Видно качественное согласие между результатами моделирования и экспериментальными данными. Важной особенностью данной модели является наличие двух физических процессов переноса газа – фильтрации и диффузии – характерные времена протекания которых различаются на несколько порядков величины. В результате, данная модель позволяет описать экспериментальные данные лучше, чем это удастся в рамках феноменологической модели сорбции [2], имеющей одно характерное время.

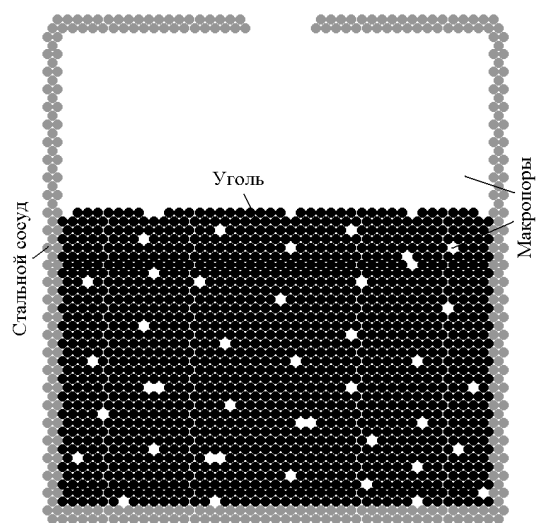


Рис. 2. Схема модельного образца.

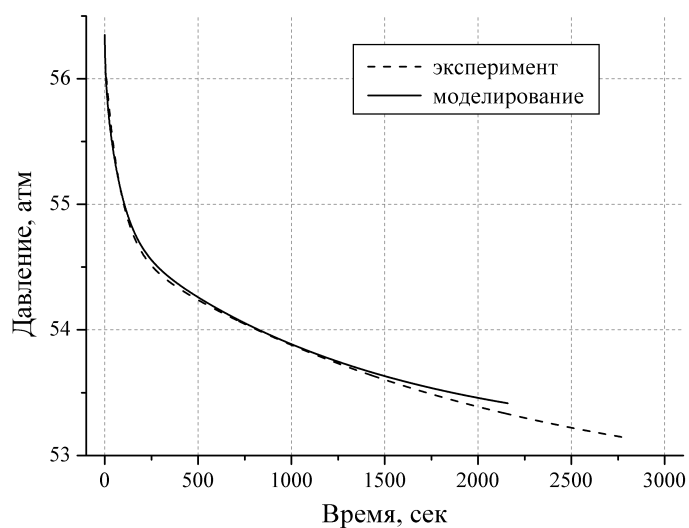


Рис. 3. Зависимость давления в сосуде от времени при сорбции  $\text{CO}_2$  в лигнит.

Очевидно, что предложенный метод не позволяет описывать весь спектр процессов, протекающих в сложной гетерогенной среде. Кроме того, использованная двумерная постановка задачи позволяет описывать реальные трехмерные системы лишь приближенно. Несмотря на это, адекватный выбор модельных параметров, определяющих как механический отклик материала, так и процессы, протекающие в газовой фазе, позволяет получить результаты, находящиеся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Это подтверждает физическую корректность постановки задачи и адекватность использованного описания основных процессов, имеющих место в моделируемой системе.

## Список литературы

- [1] Псахье С.Г., Смолин А.Ю., Коростелев С.Ю. и т.д. Исследование установления стационарного режима деформирования твердых тел методом подвижных клеточных автоматов. // ПЖТФ. 1995. Т.21 (20). С.72-76.
- [2] Zavsek, S. etc. Application of hybrid cellular automaton approach for computer-aided examination and forecast of strength properties of heterogeneous coal-beds. // Proc. 11-th Int. Conf. on Fracture, Turin, Italy. 2005. P. 4502/1-4502/6.
- [3] А.Д. Алексеев, Т.А. Василенко, К.В. Гуменник и т.д. Диффузионно-фильтрационная модель выхода метана из угольного пласта. // ЖТФ. 2007. Т.77. №4. С. 65-74.
- [4] M. Markic, R.F. Sachsenhofer. The Velenje lignite. Its petrology and genesis. Geoloski Zavod Slovenije, Ljubljana: 2010. 218 P.