Model numeryczny procesu ługowania (Proces ługowania kawern solnych cz. III)

Numerical model of leaching process. (Salt cavern leaching process p. III)

Kazimierz URBAŃCZYK

ul. Kanadyjska 34, 32-087 Zielonki, e-mail: kazeku@poczta.onet.pl

Streszczenie

Przedstawiono model matematyczno-fizyczny procesu ługowania w postaci zaproksymowanej, wykorzystując przybliżenie z jednowymiarową hydrodynamiką i warunkiem równowagi grawitacyjnej. Istotnym elementem modelu jest opis kształtu kawerny niezależny od aproksymacji jej wnętrza. Zastosowano jawny schemat różnicowy typu Leleviera z aproksymacją równania przepływu pod prąd. Opisany model jest podstawą algorytmu UBRO. Krótko omówiono też inne modele.

Slowa kluczowe: proces ługowania, kawerna solna, model procesu ługowania.

Abstract

Mathematical and physical model of leaching process is presented in the approximated form. One-dimensional hydrodynamics and gravity equilibrium condition are used to create the model. Description of the cavern shape independent on approximation of the cavern inside is significant feature of the model. An explicit scheme of Lelevier type is applied and an upwind scheme for the flow equation. The described model is the base of the UBRO algorithm. Other models are shortly discussed.

Key words: leaching process, salt cavern, model of leaching process.

WSTĘP

Niniejszy tekst jest trzecim z serii poświęconej procesowi ługowania, ukazującej się na łamach *Przeglądu Solnego*. Zamierzeniem autora jest podsumowanie wiedzy na ten temat, zwłaszcza jeśli idzie o opis matematyczno-fizyczny, jego stosowalność oraz implementacje w postaci modeli komputerowych.

Część druga (Urbańczyk 2017) omawiająca opis matematyczno-fizyczny procesu ługowania soli, zakończyła się podsumowaniem, stwierdzającym m.in. iż: stężenie solanki w kawernie jest praktycznie jedynie funkcją głębokości i czasu, zatem stan wewnątrz kawerny może być przybliżony modelem 1D (jednowymiarowym), w którym równanie Naviera-Stokesa jest bez znaczenia, a turbulencja zastąpiona warunkiem równowagi grawitacyjnej. Przy przejściu do modelu 1D, warunek brzegowy na ruchomej powierzchni przechodzi w człon źródłowy dla równania stężenia.

Równania modelu można rozwiązać jedynie drogą numeryczną. W tym celu konieczna jest jego dyskretyzacja dająca przejście od równań całkowych i różniczkowych do równań algebraicznych.

Niniejszy artykuł poświęcony jest temu przejściu i sprowadzeniu opisu procesu ługowania do postaci algebraicznej. Opisany tu jest jeden z możliwych sposobów takiego przejścia oparty na aproksymacji różnicowej równań modelu (tzw. metoda różnic skończonych). Aproksymacji dokonuje się w układzie współrzędnych walcowych. W procesie brak zależności radialnej, zatem promień nie podlega aproksymacji. Azymut aproksymuje się dzieląc kąt pełny na pewną liczbę równych sektorów, głębokość aproksymuje się jednorodnym i stałym krokiem przestrzennym. Czas aproksymuje się krokiem czasowym o zmiennej długości, stosuje się przy tym w równaniu transportu schemat jawny sprzężenia czas-głębokość, co wynika z trudności z prognozowaniem wprzód członu źródłowego (poza szczególnymi przypadkami).

Schemat ten został z sukcesem zaimplementowany w oprogramowaniu UBRO/WinUbro, które uzyskało dominu-

jącą pozycję w świecie (Kunstman&Urbańczyk 1984, 1990, 1994a, 1994b, 2000). Tego typu algorytm wykorzystano również w programie PROSACAV (Edler 1997, Kunstman&Urbańczyk 2000, Edler i in 2008)

Ogólne cechy modelu

Zdyskretyzowany model obejmuje kawernę i górotwór. Kawerna jest dzielona krokiem aproksymacyjnym głębokości na plastry (bloki) o stałej grubości i stałym położeniu. Stan kawerny w danej chwili określony jest przez objętości plastrów, stężenia solanki w plastrach i średnie prędkości przepływu między plastrami. Dodatkową zmienną może być temperatura, która wpływa na zależność między stężeniem solanki a jej gęstością, a także na wielkość kontrakcji towarzyszącej rozpuszczaniu się soli. W typowym modelu temperatura jest zadawana z zewnątrz, najczęściej jednorodna w całej kawernie i, przynajmniej okresami, stała (pomija się efekty termodynamiczne).

Górotwór jest ośrodkiem w którym powstaje kawerna. Stąd w modelu udział biorą tylko niektóre jego własności, te które wpływają na rozwój kawerny. Są to podatność na rozpuszczanie czyli współczynniki ługowania oraz udział części nierozpuszczalnych. Mogą być one funkcjami trzech zmiennych przestrzennych. W praktyce jednak rzadko uwzględnia się całą tę zależność, z uwagi na trudności jej rozpoznania. Wprowadza sie jedvnie zmienność cześci rozpuszczalnych z głębokością na podstawie profilu otworu a w przypadku współczynników ługowania zależność od głębokości i azymutu. Te ostatnią zależność można ocenić dopiero po pierwszych fazach ługowania na podstawie nieregularności kształtu zmierzonego echosondą. Górotwór dzieli się na plastry aproksymacyjne tym samym krokiem, co wnętrze kawerny i dla tych plastrów podaje się udział części nierozpuszczalnych. Współczynniki ługowania dodatkowo różnicuje się azymutalnie i w każdym sektorze określa dwa ciągi współczynników w plastrach głębokościowych. Własności górotworu są dla modelu ługowania stałymi parametrami.

W skład modelu wchodzi również opis własności solanki – relacja między jej stężeniem a gęstością w zależności od temperatury, efektywna gęstość soli w roztworze w zależności od stężenia i temperatury i wynikający stąd współczynnik kontrakcji również zależny od stężenia i temperatury.

Powierzchnia graniczna między górotworem a kawerną, czyli powierzchnia zewnętrzna kawerny (ocios), potocznie zwana kształtem kawerny, wymaga niezależnego opisu w przestrzeni trójwymiarowej. Szczególnie ważne jest by kąt nachylenia ociosu był właściwie przybliżany, bo od niego zależy szybkość ługowania czyli przemieszczania się ociosu w czasie, w głąb górotworu. Używa się współrzędnych cylindrycznych, w których opis kształtu kawerny polega na podaniu promienia jako funkcji głębokości i kąta azymutalnego. Aproksymacja polega na wprowadzeniu w każdym sektorze ekwiwalentnego półprofilu kawerny, który z kolei jest aproksymowany łamaną (ciąg odcinków powiązanych końcami--węzłami).

Trzeba tu zwrócić uwagę, że taki opis kształtu kawerny, wymagający, by każdemu azymutowi na danej głębokości odpowiadał tylko jeden promień i podobnie w każdym azymucie każdej głębokości również odpowiadał jeden promień, ma ograniczenia i nie każdy kształt kawerny da się tak opisać. Ryc. 1 przedstawia sytuacje, które nie są możliwe do przedstawienia w powyższy sposób. Przypadek A przedstawia przekrój poziomy kawerny z wnęką boczną, dla pewnego azymutu kontur trzykrotnie przecina promień. W przypadku B, kawerna ma idący w górę tzw. komin widoczny w półprofilu, zaś w przypadku C – kieszeń idącą w dół, obok głównej części kawerny. Na Ryc. 1 i dalszych rycinach kolor żółty przedstawia wnętrze kawerny, kolor niebieski – sól.

Omawiany opis stanowi istotne ograniczenie, gdyż takie przypadki jak na Ryc. 1 zdarzają się, jednak, jak dotąd, nikomu nie udało się zaproponować lepszego opisu kształtu kawerny.



Ryc. 1. Przykłady kształtów kawern, nie dających się opisać przyjętym modelem: A – wnęka boczna na przekroju poprzecznym, B – komin w półprzekroju pionowym, C – kieszeń w półprzekroju pionowym

Fig. 1. Examples of the forbidden cavern shapes in described model: A- side branch in horizontal cross section B – "chimney" in semi-profile, C - "pocket" in semi-profile



Ryc. 2. Schemat kroku czasowego w opisywanym modelu *Fig. 2. Time-step diagrams in the described model*





— kontur kawerny, —*— kontur promieni ekwiwalentnych Fig. 3. Reduction of horizontal cavern contour to sector equivalent radiuses

— cavern contour, -*— contour of equivalent radia

Aby rozpocząć symulację musimy znać stan początkowy kawerny, czyli jej kształt, objętości plastrów i stężenie w każdym z nich. Zaproksymowane równania bilansu (równanie ciągłości i równanie transportu) pozwalają wyznaczyć stan kawerny po upływie kroku czasowego.

Aby rozwiązać układ zaproksymowanych równań bilansu, trzeba najpierw wyznaczyć dla nich człon źródłowy, czyli m.in. ile soli doszło z górotworu do każdego z plastrów wskutek ługowania, ile opadło na dno części nierozpuszczalnych i jaka ilość medium ługującego jest zatłaczana do kawerny.

Dlatego symulacja każdego kroku czasowego musi się zacząć od wyznaczenia rozkładu szybkości ługowania (po głębokości i azymutach) na podstawie rozkładu stężenia w kawernie, biorąc pod uwagę nachylenie jej ścian i zróżnicowanie współczynników ługowania w górotworze. Szybkość ługowania określa przemieszczenie ścian kawerny w trakcie kroku czasowego.

Wyznaczywszy przemieszczenie ścian kawerny dostajemy nowy jej kształt. Oblicza się wtedy nowe objętości plastrów kawerny i porównując z objętościami poprzednimi, wyznacza ilości soli wyługowane w obrębie każdego z plastrów. Pozwala to wyznaczyć człon źródłowy dla równań bilansu, co umożliwia ich rozwiązanie i wyznaczenie nowych stężeń w plastrach kawerny. One stają się punktem wyjścia do nowego kroku czasowego. Ilustruje to Ryc. 2.

Podsumowanie:

Model matematyczno-fizyczny, by wykonywać przy jego pomocy obliczenia, musi być zdyskretyzowany.

Głębokość dzieli się jednorodnym i stałym krokiem aproksymacyjnym, czas krokiem o zmiennej długości, stosuje się sprzężenie schematem jawnym tzw. Leleviera. Oprócz tego zmienną azymutalną dzieli się stałym krokiem na sektory.

Parametry górotworu określa się w azymutalnych wycinkach plastrów aproksymacyjnych.

Stan kawerny określa się w plastrach kawerny, przy czym jest on zmienny w czasie.

Model ogranicza się do kształtów kawerny dających się opisać promieniem, jako funkcją głębokości i azymutu, kształt aproksymuje się niezależnie od kroku aproksymacyjnego głębokości, w każdym sektorze niezależnie, w postaci łamanej.

Symulacja w pojedynczym kroku czasowym odbywa się, jak przedstawiono na Ryc. 2.

Aproksymacja przekroju poprzecznego kawerny – sektory azymutalne

Ideę sektorów azymutalnych ilustruje Ryc. 3, na przykładzie 8 sektorów. Kontur kawerny zostaje zastąpiony 8 promieniami ekwiwalentnymi, czyli w każdym sektorze wycinek kawerny zostaje sprowadzony do wycinka koła. Promień ekwiwalentny określony jest wzorem:

.2π

$$(R_{i,eq})^{2} = \frac{K}{2\pi} \int_{(i-1)\frac{2\pi}{K}}^{l\frac{K}{K}} [R(\varphi)]^{2} d\varphi$$
(1)

gdzie:

i – numer sektora,

K – liczba sektorów,

 φ – kąt azymutalny [-],

 $R(\varphi)$ – obrys przekroju poprzecznego kawerny na jakiejś głębokości (np. otrzymany z echosondy) [m].

Taka redukcja obrysu do np. ośmiu wartości w sektorach zachowuje pole powierzchni przypadające na każdy z sektorów, a jeśli idzie o całą kawernę nie zmienia jej objętości. Jednak traci się przy tym część informacji. Gdy zachodzi potrzeba odtworzenia obrysu kawerny, na podstawie promieni ekwiwalentnych w sektorach, taki odtworzony kontur będzie "zubożony", różny mniej lub bardziej od wyjściowego konturu.

Odtwarzać kontur można na różne sposoby, jeden z nich jest następujący:

W obrębie rozpatrywanego sektora promień komory przybliża się funkcją:

$$\mathcal{R}(\varphi) = \left(\frac{K}{\pi}\right)^2 a\varphi^2 + \frac{K}{\pi}b\varphi + c \tag{2}$$

gdzie:

a, *b*, *c* – stałe [m],

 φ – tutaj kąt tak dobrany, by jego wartość (w radianach) w centrum rozpatrywanego sektora wynosiła 0, w centrum poprzedniego sektora -2 π/K , zaś w centrum następnego sektora +2 π/K ,

czynnik $\frac{\kappa}{\pi}$ został wprowadzony dla uproszczenia późniejszych rachunków.

Funkcja $R(\varphi)$ musi spełniać warunek równości pola, tzn. dawać w sektorze pole identyczne jak promień ekwiwalentny:

$$\frac{K}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{K}}^{\overline{K}} [\mathcal{R}(\varphi)]^2 \, d\varphi = \left(R_{eq}\right)^2 \tag{3}$$

Uwzględniając (2) zachodzi warunek:

$$\frac{1}{5}a^2 + \frac{1}{3}b^2 + c^2 + \frac{2}{3}ac = \left(R_{eq}\right)^2 \tag{4}$$

Wprowadzając oznaczenia:

π

$$\begin{aligned} R_{\frac{1}{2}} &= R\left(\frac{\pi}{K}\right) \\ R_{-\frac{1}{2}} &= R\left(-\frac{\pi}{K}\right) \\ \alpha &= \frac{8}{15} \\ \beta &= \frac{2}{3}\left(R_{\frac{1}{2}} + R_{-\frac{1}{2}}\right) \end{aligned}$$

$$\gamma = \frac{1}{3} \left(\left(R_{\frac{1}{2}} \right)^2 + \left(R_{-\frac{1}{2}} \right)^2 + R_{\frac{1}{2}} R_{-\frac{1}{2}} \right) - \left(R_{eq} \right)^2$$

otrzymuje się:

$$a = \frac{\beta - \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}}{2\alpha} \tag{5}$$

$$b = \frac{1}{2} \left(R_{\frac{1}{2}} - R_{-\frac{1}{2}} \right) \tag{6}$$

$$\mathbf{c} = a - \frac{1}{2} \left(R_{\frac{1}{2}} + R_{-\frac{1}{2}} \right) \tag{7}$$

Pozostaje wyznaczenie wartości $R_{\frac{1}{2}}$ i $R_{-\frac{1}{2}}$, t.j. promieni na granicach sektorów.

Jedną z możliwości, stosunkowo dobrze działającą, jest przyjęcie, że są one średnimi harmonicznymi wartości ekwiwalentnych w sąsiednich sektorach:

$$R_{\frac{1}{2}} = \frac{2 R_{(i+1),eq} R_{i,eq}}{R_{(i+1),eq} + R_{i,eq}}$$
(8)

$$R_{-\frac{1}{2}} = \frac{2 R_{(i-1),eq} R_{i,eq}}{R_{(i-1),eq} + R_{i,eq}}$$
(9)

Odtworzony tą metodą kontur, na przykładzie 8 sektorów przedstawia Ryc. 4. Widać, że odtworzony obrys (linia niebieska) różni się od wyjściowego (linia czerwona).





Podsumowanie:

W przekroju poziomym kształt kawerny jest wyrażony przez wartości promieni ekwiwalentnych w sektorach. Dzięki temu powierzchnia przekroju i, co za tym idzie, objętość kawerny jest zachowana.

W razie potrzeby, jest procedura przejścia od promieni ekwiwalentnych do ciągłego obrysu. Jednak będzie ona tylko przybliżała rzeczywisty obrys, bo przy przejściu do promieni ekwiwalentnych część informacji ginie.

PIONOWY PÓŁPROFIL KAWERNY W SEKTORZE

W sektorze azymutalnym promień ekwiwalentny jako funkcję głębokości przybliża się łamaną, jak przedstawia to Ryc. 5. Każdy z odcinków tej łamanej jest określony przez dwa punkty węzłowe: początkowy i końcowy, tj.: (H_i, R_i) i (H_{i+1}, R_{i+1}) .



 Ryc. 5. Aproksymacja łamaną pionowego półprofilu kawerny

 — kontur kawerny, — kontur zaproksymowany

 Fig. 5. Approximation of the cavern vertical semi-profile by an open polygonal line

 — cavern contour, — approximated contour

Ponieważ w przyjętym opisie promień kawerny jest funkcją głębokości, głębokości kolejnych punktów wyznaczających półprofil kawerny muszą spełniać warunek monotoniczności:

$$H_i > H_{i+1} \tag{10}$$

Teoretycznie można by przyjąć warunek przeciwny do (10), jednak ponieważ kawerny ługownicze rozwijają się od dołu ku górze, praktyczniej jest przyjąć za H_1 najgłębszy punkt kawerny.

Ciąg punktów (H_i, R_i) zarazem określa parametry równań prostych na których leżą poszczególne odcinki półprofilu.

$$r = a_i h + b_i \tag{11}$$

$$a_i = \frac{R_{i+1} - R_i}{H_{i+1} - H_i} \tag{12}$$

$$b_i = R_i - a_i H_i = \frac{R_i H_{i+1} - R_{i+1} H_i}{H_{i+1} - H_i}$$
(13)

Zachodzi związek

$$a_i = -\operatorname{ctg} \psi_i \tag{14}$$

$$\sin\psi_i = \frac{1}{\sqrt{a_i^2 + 1}} \tag{15}$$

gdzie:

 ψ_i – kąt nachylenia rozpatrywanego odcinka łamanej [-], przy czym 0° oznacza płaskie dno, 90° - pionowy ocios, 180° - poziomy strop.

Biorąc pod uwagę kwestie numeryczne, warunek (10) został zmodyfikowany do postaci:

$$-\operatorname{ctg}\psi_{ar} \leq a_i \leq -\operatorname{ctg}\psi_{str}$$
 (16)

gdzie:

 ψ_{gr} – graniczny kąt ługowania [-],

 ψ_{err} – stropowy kąt ługowania [-].

Kąt graniczny ługowania to wielkość fizykalna, dla niższych nachyleń szybkość ługowania jest zerem, bo części nierozpuszczalne nie ześlizgują się z ługowanej powierzchni i powstaje między nimi warstewka nasyconego roztworu. Natomiast kąt stropowy jest związany z kwestiami numerycznymi, kiedy trzeba odejmować małe *a* od dużego *a*. Przy dokładności obliczeń w czasach, gdy powstawał algorytm UBRO, graniczna wartość *a* była rzędu 50-100. 179° było wartością "okrągłą" (180°-1°), i wystarczającą by algorytm działał prawidłowo. Wartość tę zostawiono w późniejszych implementacjach.

Z tych samych powodów przyjęto, że $\psi_{or} \ge 1^{\circ}$.

Podsumowanie:

Półprofil pionowy każdego z sektorów przedstawia się jako łamaną. Głębokości kolejnych punktów węzłowych muszą tworzyć ciąg malejący.

Nachylenia odcinków łamanej muszą mieścić się w przedziale wyznaczonym przez graniczny kąt ługowania oraz kąt ługowania stropowego.

Kąt ługowania stropowego wprowadzony został z przyczyn numerycznych, dla opisywanego modelu przyjęto 179°.

Przemieszczenie pionowego półprofilu kawerny w kroku czasowym

W trakcie pojedynczego kroku czasowego Δt następuje przesunięcie konturu, zgodnie z szybkością ługowania, zależną od wartości współczynników szybkości ługowania i stężenia na danej głębokości. Przemieszczenie konturu kawerny w kierunku normalnym do konturu wyraża się formułą:

$$\Delta n(h) = \omega(h) \Delta t \tag{17}$$

przyrost promienia:

$$\Delta r(h) = \frac{\omega(h)\Delta t}{\sin\psi}$$
(18)

gdzie:

zaś

 ω – szybkość ługowania określona wzorami (19) (20) [m/s] **n** = (cos ψ , sin ψ) – kierunek normalny do ługowanej powierzchni

 ψ – kąt nachylenia ociosu na rozpatrywanej głębokości [-].

$$\omega(\psi, T, C) = k(\psi) \left(1 + 0.0262(T - 20^{\circ}C) \right) \frac{(C_N - C)^{1.5} C_N^{0.5}}{(C_N (20^{\circ}C))^2} \quad (19)$$

$$k(\psi) = \begin{cases} 0 & \text{dla } 0 \le \psi \le \psi_{gr} \\ k_h \frac{\sin^2 \psi - \sin^2 \psi_{gr}}{1 - \sin^2 \psi_{gr}} & \text{dla } \psi_{gr} \le \psi \le \frac{\pi}{2} \\ k_h \sin^2 \psi + k_\nu \cos^2 \psi & \text{dla } \frac{\pi}{2} \le \psi \le \pi \end{cases} \quad (20)$$

gdzie:

T – temperatura roztworu ługującego [°C],

C – stężenie roztworu ługującego [kg/m³],

 C_N – stężenie roztworu nasyconego [kg/m³],

 k_{μ} , k_{ν} – współczynniki ługowania, boczny i stropowy [m/s].

We wzorze (18), w stosunku do wzoru (42) z poprzedniej publikacji (Urbańczyk 2017) przyjęto ξ =0, czyli cos ξ = 1, co

jest związane z koncepcją konturów ekwiwalentnych w sektorach.

Odcinki leżące w jednym plastrze Δh lub w strefie jednorodnej szybkości ługowania ulegają równoległemu przesunięciu (Δr jest dla całego odcinka jednakowe). Odcinki nie obejmujące pełnych dwóch plastrów także przesuwane są zawsze równolegle, według szybkości ługowania dla środka odcinka.

Równanie prostej, na której leży odcinek przesunięty równolegle, określa poniższa formuła:

$$r = a'_i h + b'_i \tag{21}$$

$$a'_i = a_i \tag{22}$$

$$b'_{i} = b_{i} + \Delta R_{i} = b_{i} + \frac{\omega(H_{i})\,\Delta t}{\sin\psi_{i}} = b_{i} + \,\omega(H_{i})\,\Delta t\sqrt{1 + a_{i}^{2}}$$
(23)

gdzie:

a, *b* – parametry prostej odcinka przed przemieszczeniem [-],[m],

a', *b'*– parametry prostej odcinka po przemieszczeniu [-],[m], H_i – głębokość środka odcinka [m].

Odcinki, które obejmują tylko 2 pełne sąsiednie plastry Δh , przesuwane są z przemieszczeniem wypadkowym z przesunięć w wyższym i niższym plastrze (por. Ryc. 6.). Wpływ niepełnych plastrów, w których leżą końce odcinków zaniedbuje się. Nachylenie odcinka ulega zmianie, jeśli w wyższym i niższym plastrze są różne szybkości ługowania (np. z powodu różnych stężeń). Parametry prostej, na której leży odcinek określa formuła:

$$a'_{i} = a_{i} + \frac{(\omega_{i+1} - \omega_{i})\Delta t \sqrt{1 + a_{i}^{2}}}{H_{i+1} - H_{i}}$$
(24)



Ryc. 6. Przemieszczanie odcinka obejmującego dwa pełne plastry aproksymacyjne
— odcinek przed przemieszczeniem, – – przemieszczone części odcinka, — odcinek po przemieszczeniu (wypadkowym),
— – – – oś kawerny
Fig. 6. Displacement of the contour segment containing two entire approximation slices.

Fig. 6. Displacement of the contour segment containing two entire approximation slices

- the segment before the displacement, --- displaced parts of the segment, --- the segment after the net displacement,

$$b'_{i} = b_{i} + \frac{(\omega_{i}H_{i+1} - \omega_{i+1}H_{i})\Delta t\sqrt{1 + a_{i}^{2}}}{H_{i+1} - H_{i}}$$
(25)

gdzie:

 H_i , H_{i+1} – głębokości środków plastrów aproksymacyjnych [m].

Kolorem żółtym wypełniono wnętrze kawerny, niebieskim sól, bladoniebieskim sól wyługowaną w rozpatrywanym kroku czasowym.

Dla odcinków dłuższych, obejmujących 3-5 pełnych plastrów, wypadkowe przemieszczenie wyznaczane jest metodą najmniejszych kwadratów z przesunięć w poszczególnych plastrach (por. Ryc. 7).

$$a' = a + \frac{n \sum (\omega_{i+j} H_{i+j}) - (\sum \omega_{i+j}) (\sum H_{i+j})}{n \sum H_{i+j}^2 - (\sum H_{i+j})^2} \Delta t \sqrt{1 - a^2}$$
(26)

$$b' = b + \frac{(\sum H_{i+j}^{2})(\sum \omega_{i+j}) - (\sum H_{i+j})(\sum (\omega_{i+j}H_{i+j}))}{n \sum H_{i+j}^{2} - (\sum H_{i+j})^{2}} \Delta t \sqrt{1 - a^{2}}$$
(27)

gdzie:

we wszystkich sumach sumowanie przebiega poj od zera do (n-1),

n – liczba pełnych plastrów komory objętych przez odcinek,

H_i – głębokość odpowiadająca środkowi *i*-tego plastra [m],

 ω_i – szybkość ługowania w *i*-tym plastrze [m/s].



Ryc. 7. Przemieszczanie odcinka obejmującego cztery pełne plastry aproksymacyjne
 odcinek przed przemieszczeniem, - - przemieszczone części odcinka, - odcinek po przemieszczeniu (wypadkowym), - · - · - oś kawerny
 Fig. 7. Displacement of the contour segment containing four entire approximation slices.

the segment before the displacement, — — displaced parts of the segment, — — the segment after the net displacement, — · — · — cavern axis

Natomiast odcinki obejmujące więcej niż 5 plastrów dzieli się na równe części, z których każda jest traktowana jak niezależny odcinek. Części jest tyle, by każda obejmowała nie mniej niż dwa pełne odcinki, ale nie więcej niż pięć.

Aby stworzyć możliwość "zaokrąglenia" ostrym krawędziom, wprowadzono dodatkową regułę: odcinki, których górny sąsiad jest prawie pionowy, a dolny prawie stropowy, przesuwane są o połowę szybciej, zaś odcinki, których górny sąsiad jest prawie stropowy a dolny - prawie pionowy, przesuwane są o połowę wolniej.

Odcinek o nachyleniu stropowym (lub jemu bliskim), jeśli położony jest w pobliżu dolnej granicy plastra, przesuwany jest z szybkością odpowiadającą stężeniu plaster niżej. Gdyby nie ta reguła, przy obiegu lewym mogłoby dochodzić do stężenia ponadnasyconego, skutkiem zbyt dużego przyrostu objętości plastra w jednym kroku czasowym.

Po przemieszczeniu prostych odpowiadających odcinkom konturu kawerny, wyznacza się punkty przecięcia przemieszczonych prostych, które wyznaczą nowy półprofil kawerny, po kroku czasowym. Położenia tych punktów nowego profilu wyznacza się wzorami:

$$H'_{i} = \frac{b'_{i-1} - b'_{i}}{a'_{i} - a'_{i-1}}$$
(28)

$$R'_{i} = \frac{a'_{i}b'_{i-1} - a'_{i-1}b'_{i}}{a'_{i} - a'_{i-1}}$$
(29)



Ryc. 8. Nowy półprofil kawerny wyznaczają punkty przecięcia przemieszczonych prostych odcinków starego półprofilu — kontur przed przemieszczeniem, — kontur po przemieszczeniu, – · – · – oś kawerny *Fig. 8. New cavern semi-profile is determined by intersection points of displaced straits of the old cavern semi-profile* — the contour before the displacement, — the contour after the displacement, – · – · – cavern axis

Ryc. 8 ilustruje jak punkty przecięcia przemieszczonych prostych wyznaczają nowy półprofil kawerny. Warto zwrócić uwagę, że punkty końcowe przemieszczonego odcinka AB, tzn. A' i B' leżą na innych głębokościach, niż punkty A i B przed przemieszczeniem.

Wzory (28) i (29) nie mają zastosowania w przypadku, gdy $a'_i \approx a'_{i-1}$, czyli gdy proste (*i*-1) oraz *i* są równoległe, lub bliskie równoległości. Wówczas albo w ogóle się nie przecinają, albo ich punkt przecięcia jest niefizyczny, położony wysoko w górze, głęboko w dole, lub ma ujemny promień , czy tp. Wymaga to wstawienia dodatkowego odcinka pomiędzy owe bliskie równoległości. Zależnie od konfiguracji, dodatkowy odcinek ma nachylenie stropowe, bądź granicznego kąta ługowania.



Ryc. 9. Wstawienie odcinka o nachyleniu granicznym, gdy punkt przecięcia przesuniętych prostych leży zbyt wysoko — kontur przed przemieszczeniem, — kontur po przemieszczeniu, — · - · oś kawerny *Fig. 9. Insertion of the new segment of the boundary inclination in the case where intersection point lies too high* — the contour before the displacement, — the contour after the displacement, — · - · cavern axis

Ryc. 9. przedstawia przypadek gdy punkt A' odpowiadający punktowi A leży wysoko, poza rysunkiem, gdyż przecinające się w nim proste są prawie równoległe. Konieczne jest wstawienie dodatkowego odcinka A'₁A'₂, o nachyleniu granicznym





Ryc. 10. przedstawia inny przypadek niefizycznego punktu przecięcia, gdy punkt A' odpowiadający punktowi A ma promień ujemny, gdyż przecinające się w nim proste są prawie równoległe. Konieczne jest wstawienie dodatkowego odcinka A'₁A'₂, o nachyleniu stropowym 179°.

Należy dodać, że jeśli odcinek wstawiony między dwie proste równoległe miałby być bardzo krótki, nie wstawia się odcinka, a proste scala w jedną. Jako kryterium krótkości odcinka można przyjąć np. jedną dziesiątą przesunięcia ociosu kawerny na poziomie rury wodnej.

Jeszcze w jednym przypadku wstawia się dodatkowy odcinek. Jeśli kąt między sąsiednimi odcinkami jest mniejszy niż 105°, wprowadza się prostą 1, równonachyloną do obu odcinków, jak ilustruje to Ryc. 11, a przemieszczoną względem punktu B o ²/₃ odcinka, o jaki przemieściłaby się prosta o tym nachyleniu.

Skrajne punkty półprofilu kawerny nie ulegają przemieszczeniu, dlatego pierwszy przesunięty odcinek musi mieć nachylenie graniczne, a ostatni odcinek – stropowe. Jeśli takich odcinków brak, to dodaje się je w najbliższym kroku czasowym. Dodanie odcinka w stropie kawerny ilustruje Ryc. 12. C jest skrajnym górnym punktem półprofilu. Ponieważ odcinek AC początkowego konturu ma małe nachylenie, w konturze przemieszczonym pojawia się dodatkowa prosta 1 o nachyleniu stropowym i jej przecięcie B' z ostatnią przemieszczoną prostą starego konturu wyznacza dodatkowy odcinek B'C'. Odcinek stropowy nie przemieszcza się (bo strop jest izolowany) i w następnym kroku czasowym nie ma już potrzeby dodawania odcinka.



Ryc. 11. Wstawienie odcinka o nachyleniu pośrednim, gdy kąt między przesuniętymi prostymi jest mniejszy niż 105°.
kontur przed przemieszczeniem, — kontur po przemieszczeniu, — · - · - oś kawerny *Fig.* 11. Insertion of the new segment of the intermediate inclination in the case where the angle between displaced straits is less than 105°
the contour before the displacement, — the contour after the displacement, - · - · - cavern axis



Ryc. 12. Wstawienie odcinka o nachyleniu stropowym, tworzącego izolowany strop kawerny

kontur przed przemieszczeniem, — kontur po przemieszczeniu, – · – · – oś kawerny

Fig. 12. Insertion of the new segment of the roof inclination, creating the isolated cavern roof the contour before the displacement, — the contour after the displacement, — - - - cavern axis W podobny sposób dodaje się odcinek o granicznym nachyleniu na dole kawerny, jeśli zachodzi taka potrzeba.

Oprócz pojawiania się w konturze dodatkowych odcinków, mogą zdarzyć się przypadki zaniku odcinków. Klasyczny przypadek takiego zaniku przedstawia Ryc. 15. Punkty przecięcia się przesuniętych prostych są położone niewłaściwie: punkt A' płycej niż punkt B'. Odcinek A'B' zmienił zwrot, stał się "ujemny". Prostą 1 należy wyeliminować z profilu, a odcinek zastąpić jednym punktem AB'.



Ryc. 13. Zanik odcinka, który po przemieszczeniu "zmienił zwrot"
kontur przed przemieszczeniem, kontur po przemieszczeniu, - · - · - oś kawerny *Fig. 13. Vanishing of the segment which reversed direction after displacement*the contour before the displacement, the contour after the displacement, - · - · - cavern axis

Szczególny przypadek zmiany zwrotu odcinka zachodzi, gdy przekracza on izolowany strop (Ryc. 14). Jedyna istotna różnica w stosunku do poprzedniego przypadku jest ta, że odcinek stropowy nie ulega przemieszczeniu. Odcinek A'B' znalazł się ponad stropem, w związku z tym zastąpiony zostaje punktem AB', leżącym na prostej 2, o nachyleniu stropowym, zaś prosta 1 wypada z konturu.

Do zastąpienia odcinka jednym punktem może też dojść nawet gdy swego zwrotu nie zmienił, ale jego długość stała się porównywalna z dokładnością obliczeń. Nie ma większego sensu rozpatrywania odcinków długości 1 mm lub krótszych.

Ostatni przypadek wymagający omówienia, to zastąpienie trzech odcinków, które znalazły się w jednym plastrze aproksymacyjnym, jednym odcinkiem, co ilustruje Ryc. 15.



Ryc. 14. Zanik odcinka, który po przemieszczeniu znalazł się nad stropem kawerny

kontur przed przemieszczeniem, kontur po przemieszczeniu, - · - · - oś kawerny

Fig. 14. Vanishing of the segment which displaced above the cavern roof

the contour before the displacement, — the contour after the displacement, — \cdot — \cdot — <i>cavern axis



Ryc. 15. Zastąpienie trzech odcinków jednym, gdy znalazły się w obrębie jednego plastra
 kontur przed przemieszczeniem, kontur po przemieszczeniu, - · - · - oś kawerny

Fig. 15. Three segments are replaced by one segment if they are found within one slice

the contour before the displacement, _____ the contour after the displacement, _____ cavern axis

Na początku kroku czasowego punkt A znajdował się w niższym plastrze niż punkty B, C, D, odcinek AB jedynie częściowo leżał w rozpatrywanym plastrze. Po kroku czasowym punkt A' już wszedł do plastra, w którym pozostały punkty B', C' i D'. Dlatego punkty B' i C' eliminowane są z profilu.

Podsumowanie:

Nowy kształt kawerny wyznacza się przemieszczając proste, na których leżą odcinki półprofilu i wyznaczając nowe punkty ich przecięć.

Przemieszczenia prostych zależą od szybkości ługowania. Może dojść do zmiany nachylenia prostej w przypadku zróżnicowania tej szybkości w obrębie odcinka.

Przy pewnych konfiguracjach mogą w półprofilu pewne odcinki zanikać, albo pojawić się nowe.

Nie podlega przemieszczaniu dolna część półprofilu, jeśli w niej solanka jest nasycona, oraz górna, w obrębie izolacji. Przemieszczana część zaczyna się odcinkiem o nachyleniu granicznym a kończy odcinkiem o nachyleniu stropowym.

Obliczanie przyrostów objętości plastrów kawerny

Kiedy są już znane kształty kawerny przed i po kroku czasowym, należy wyznaczyć przyrosty objętości w kolejnych plastrach aproksymacyjnych. Objętość plastra kawerny składa się z objętości sektorów plastra. Objętość sektora z kolei składa się z objętości wycinków stożków ściętych. Każdy odcinek półprofilu kawerny w sektorze jest tworzącą takiego stożka.

Objętość wycinka stożka ściętego wyraża się wzorem:

$$V_{im} = \frac{\pi}{3K} \left(R_{im}^{2} + R_{(i+1)m}^{2} + R_{im}R_{(i+1)m} \right) \left(H_{im} - H_{(i+1)m} \right)$$
(30)

gdzie:

 V_{im} – objętość wycinka stożka w sektorze *m*, utworzonego przez *i*-ty odcinek półprofilu [m³],

 $(R_{im}, H_{im}), (R_{(i+1)m}, H_{(i+1)m})$ – promienie i głębokości punktów wyznaczających *i*-ty odcinek półprofilu w sektorze *m* [m],

K – liczba sektorów.

Jeśli odcinek przecina granicę plastrów, dzieli się go na dwie części, interpolując wartość na głębokości dzielącej dwa plastry:

$$RR = R_{im} + \frac{R_{im} - R_{(i+1)m}}{H_{im} - H_{(i+1)m}} \left(H_{ij} - HH\right)$$
(31)

gdzie:

 $(R_{im}, H_{im}), (R_{(i+1)m}, H_{(i+1)m})$ – promienie i głębokości punktów wyznaczających *i*-ty odcinek półprofilu w sektorze *m* [m],

(*RR*, *HH*) – promień i głębokość punktu na granicy dwóch plastrów i na *i*-tym odcinku półprofilu w sektorze *m* [m].

Jeśli przez plaster przechodzą rury ługownicze, ich objętość (wycinek walca) należy odjąć od objętości wyliczonej wg (30).

Sumując stożki ścięte w kolejnych sektorach a następnie objętości sektorów w obrębie plastra otrzymujemy objętość plastra. Przyrosty objętości plastrów są różnicami objętości na końcu kroku Δt i na jego początku:

$$\Delta V_{i} = \sum_{m=1}^{K} (V'_{im} - V_{im})$$
(32)

 V_{im} , V'_{im} – objętości wycinka *i*-tego plastra w sektorze *m*, na początku i na końcu kroku czasowego Δt [m³],

 ΔV_i – przyrost objętości *i*-tego plastra w ciągu kroku czasowego Δt [m³].

Podsumowanie:

gdzie:

Objętości plastrów kawerny oblicza się sumując objętości wycinków plastra w sektorach. Te z kolei oblicza się sumując objętości wycinków stożków ściętych, jakie składają się na dany wycinek plastra.

Obliczanie stężeń solanki w kawernie

Podstawowe równania modelu, to podane w poprzedniej publikacji (Urbańczyk 2017) wzory (40), (53) i (62) z odpowiednimi podstawieniami. Do równań tych stosuje się aproksymację różnicową.

Całkowanie przekroju poprzecznego po głębokości daje objętość, całkowanie prędkości ługowania z kolei daje przyrost objętości na jednostkę czasu. Przyrosty objętości w różnych sektorach mogą być różne, zwłaszcza jeśli kształt komory nie jest osiowo-symetryczny, a współczynniki szybkości ługowania są zróżnicowane między sektorami. Tego zróżnicowania nie da się jednak wyznaczyć na podstawie analiz rdzenia pobranego z otworu, można je oszacować dopiero w trakcie ługowania na podstawie odstępstw kształtu zmierzonego przez echosondę od symetrii osiowej lub prognozy przy współczynnikach niezróżnicowanych. Natomiast zależność od azymutu zawartości części nierozpuszczalnych jest niewyznaczalna.

Równanie transportu (bilans masy soli) po zaproksymowaniu przyjmuje postać:

$$\frac{1}{\Delta t} (V'_{i}C'_{i} - V_{i}C_{i}) = S_{i+1}C_{m}v_{i+1} - S_{i}C_{n}v_{i} + Q_{WE}C_{WE}\delta_{ii_{WE}} - Q_{WY}C_{WY}\delta_{ii_{WY}} - Q_{N}C_{N}\delta_{ii_{N}} + \frac{\Delta V_{i}}{\Delta t}(1 - (p_{N})_{i})(\rho_{ZL})_{i}$$

gdzie:

plaster *i*-1 leży poniżej plastra *i*, a plaster *i*+1 powyżej,

 C_i , C'_i – stężenie w plastrze *i* na początku i na końcu kroku czasowego Δt [kg/m³],

$$C_m = \begin{cases} C_{i+1} \text{ gdy } v_{i+1} > 0 \\ C_i \text{ gdy } v_{i+1} < 0 \end{cases}$$
$$C_n = \begin{cases} C_i \text{ gdy } v_i > 0 \\ C_{i-1} \text{ gdy } v_i < 0 \end{cases}$$

 C_{WE} , C_{WP} , C_N – stężenie medium ługującego (zero, gdy jest to słodka woda), stężenie produkowanej solanki i stężenie w najniższym niezasypanym plastrze kawerny [kg/m³],

 (p_{N_i}) – udział objętościowy części nierozpuszczalnych w skale solnej w plastrze *i* [-],

 Q_{WE} , Q_{WY} , Q_N – wydajność zatłaczania medium ługującego, wydajność odbioru produkowanej solanki i objętość osiadania części nierozpuszczalnych w najniższym niezasypanym plastrze kawerny, na jednostkę czasu [m³/s],

 S_{i} , S_{i+1} – powierzchnie dolna i górna plastra *i* [m²],

 Δt – krok czasowy [s],

 V_i , V'_i – objętości *i*-tego plastra na początku i na końcu kroku czasowego Δt [m³],

 ΔV_i – przyrost objętości *i*-tego plastra w ciągu kroku czasowego Δt [m³],

 v_i , v_{i+1} – średnie prędkości przepływu solanki: przez S_i powierzchnię dolną plastra *i*, oraz przez S_{i+1} powierzchnię górną, jeśli przepływ jest w dół, to są dodatnie, jeśli w górę – ujemne [m/s],

 $(\rho_{_{TI}})_i$ – gęstość soli w złożu solnym w plastrze *i* [kg/m³],

 δ_{iiWE} – symbol Kroneckera, równy 1 gdy $i=i_{WE}$, inaczej równy zero, podobnie δ_{iiWY} , δ_{iiN} .

Krok aproksymacyjný głębokości Δh nie występuje jawnie w (33), zawarty jest on w objętości plastra i jej przyroście. Aproksymacja czasu jest tu sprzężona z aproksymacją głębokości schematem jawnym. Aby zapewnić zbieżność aproksymacji, aproksymacja przepływu musi być prowadzona "pod prąd", stąd zależność C_m i C_n od kierunku przepływu (Potter 1977). Taki schemat bywa w literaturze nazywany schematem Leleviera.

Równanie ciągłości (bilans objętości) po zaproksymowaniu przyjmuje postać:

$$S_{i+1}v_{i+1} - S_iv_i = \frac{\Delta V_i}{\Delta t} (1 - (p_N)_i) \left(1 - \frac{(\rho_{ZL})_i}{\rho_{SR}}\right) + \frac{\Delta V_i}{\Delta t} (p_N)_i + Q_{WE}\delta_{ii_{WE}} - Q_{WY}\delta_{ii_{WY}} - Q_N\delta_{ii_N}$$
(34)

gdzie:

 ρ_{sp} – efektywna gęstość soli w roztworze [kg/m³],

pozostałe oznaczenia jak w równaniu poprzednim.

Efektywna gęstość soli w roztworze ρ_{SR} jest wprowadzona tak, aby spełniała równanie:

$$\rho = \rho_W + C \left(1 - \frac{\rho_W}{\rho_{SR}} \right) \tag{35}$$

gdzie:

(33)

ho – gęstość solanki [kg/m³], ho_w – gęstość wody [kg/m³].

Efektywna gęstość soli w roztworze jest funkcją stężenia i temperatury, a także zależy w pewnym stopniu od typu soli – udziału domieszek innych soli rozpuszczalnych w skale solnej. Wyznacza się ją empirycznie, na podstawie pomiarów gęstości solanki. Wielomian aproksymacyjny dla soli z wysadu Mogilno podają Kunstman i in. (2004, 2007).

Interpretacja równań (33) i (34) jest prosta i bezpośrednia.

Dwa wyrazy po lewej stronie (33) oznaczają sól zawartą w objętości plastra na końcu i na początku kroku czasowego Δt . Na różnicę pomiędzy nimi składają się (prawa strona) sól, która wpłynęła do plastra, sól, która wypłynęła z plastra w związku ze średnim przepływem przez kawernę, dalej sól zatłoczona z medium ługującym, o ile but rury wodnej znajduje się wewnątrz plastra, sól wydobyta w solance, o ile but rury solankowej znajduje się w plastrze, sól w solance wypchniętej przez części nierozpuszczalne, o ile plaster znajduje się na dole kawerny oraz sól wyługowana w obrębie plastra.

Dwa wyrazy po lewej stronie (34) oznaczają objętość cieczy, która wpłynęła i która wypłynęła z plastra w związku ze średnim przepływem przez kawernę. Na różnicę składa się kontrakcja towarzysząca rozpuszczaniu soli, objętość części nierozpuszczalnych, które opadły na dno oraz objętość zatłoczonego medium ługującego o ile but rury wodnej znajduje się w obrębie plastra, objętość wydobytej solanki, o ile but rury solankowej znajduje się w plastrze, oraz objętość solanki wypchniętej przez części nierozpuszczalne, o ile plaster znajduje się na dole kawerny.

Warunek równowagi grawitacyjnej ma postać:

$$C_{i+1} \ge C_i \tag{36}$$

Jeśli dojdzie do naruszenia tego warunku, należy w danym momencie stężenie uśrednić wg wzoru:

$$C_{sr} = \frac{\sum_{j=i_{1}}^{i_{2}} C_{j} V_{j}}{\sum_{j=i_{1}}^{i_{2}} V_{j}}$$
(37)

gdzie:

 i_1 – dolna granica strefy inwersji; dla $i < i_1$ warunek (36) jest zachowany,

 i_2 – największa głębokość zapewniająca likwidację inwersji, taka że:

$$C_{sr} \le C_i \quad \forall i > i_2 \tag{38}$$

przy czym kontrolę warunku (36) należy przeprowadzać od stropu kawerny ku spągowi, czyli od największego *i* po coraz malejącym.

Na dnie kawerny warunki brzegowe są zerowe:

$$S_{i_D}C_m v_{i_D} = 0 \tag{39a}$$

$$S_{i_D} v_{i_D} = 0 \tag{39b}$$

Przy stropie izolowanym również warunki brzegowe są zerowe:

$$S_{i_{IZ}}C_n v_{i_{IZ}} = 0 \tag{40a}$$

$$S_{i_{IZ}}v_{i_{IZ}} = 0 \tag{40b}$$

Przy stropie nieizolowanym:

$$S_{i_G} C_n v_{i_G} = \left(1 - (p_N)_{i_G}\right) \frac{\Delta V_S}{\Delta t}$$
^(41a)

$$S_{i_G} v_{i_G} = -\left(1 - \left(1 - (p_N)_{i_G}\right) \frac{(\rho_{ZL})_{i_G}}{\rho_{SR}}\right) \frac{\Delta V_S}{\Delta t} \quad (41b)$$

gdzie:

 i_D – numer dolnego niezasypanego plastra kawerny,

 i_{IZ} – numer górnego plastra kawerny z poziomem izolacji,

 i_G – numer chwilowo górnego plastra kawerny zawierającego jej strop,

 $\rho_{_{ZI}}$ – gęstość soli w złożu solnym [kg/m³],

 $\rho_{_{SR}}$ – efektywna gęstość soli w roztworze [kg/m³],

 ΔV_s – przyrost objętości w stropie kawerny w ciągu kroku czasowego Δt [m³],

Dla kompletności równań potrzebne są jeszcze wyrażenia na Q_{WE} , Q_{WY} , Q_{N} . Zwykle dana jest Q_{WE} – wydajność zatłaczania medium ługującego. Wydajność produkcji solanki jest wtedy dana wzorem:

$$Q_{WE} - Q_{WY} = \frac{1}{\Delta t} \sum_{j=j_D}^{j_{IZ}} (V'_j - V_j) (1 - (p_N)_j) \left(1 - \frac{\rho_{ZL_j}}{\varrho_{SR}}\right)$$
(42)

Tempo osiadania części nierozpuszczalnych na dnie kawerny wyraża się z kolei relacją:

$$Q_N = \frac{\Delta V_N}{\Delta t} = \frac{1}{\Delta t} \sum_{j=j_D}^{JIZ} (V'_j - V_j) (p_N)_j \quad (43)$$

gdzie:

 $(\Delta V_N)_j$ – ilość części nierozpuszczalnych uwolnionych w danym kroku czasowym w plastrze *j*,

 ΔV_N – sumaryczna ilość części nierozpuszczalnych uwolnionych w całej kawernie,

V_i – objętość plastra j na początku kroku czasowego,

 V'_i – objętość plastra j na końcu kroku czasowego,

 $(p_N)_j$ – udział objętościowy części nierozpuszczalnych w skale solnej, w plastrze *j*,

 j_D – najniższy plaster kawerny niewypełniony częściami nierozpuszczalnymi,

 j_{IZ} – najwyższy plaster kawerny, zawierający lustro izolacji lub strop.

Podsumowanie:

W trakcie wykonywanie kolejnego kroku czasowego, mając nowe objętości plastrów kawerny można obliczyć ilość soli wyługowanej i uwolnionych części nierozpuszczalnych, można rozwiązać równania bilansu soli i bilansu objętości i określić nowy rozkład stężenia.

Oprócz przepływu wywołanego zatłaczaniem medium ługującego, w kawernie występuje niewielki przepływ solanki wypchniętej z rząpia kawerny przez części nierozpuszczalne.

W nowym rozkładzie stężeń należy zlikwidować ewentualne strefy inwersji grawitacyjnej.

66

Ograniczenia kroku czasowego

Jak już była mowa, aproksymacja czasu krokiem Δt i głębokości krokiem Δh są sprzężone schematem jawnym, pod prąd (up-wind). Aby schemat taki był zbieżny i stabilny, krok czasowy musi spełniać dwa ograniczenia.

Po pierwsze - warunek Couranta-Friedrichsa-Lewy'ego, w tym przypadku wymagający, by objętość solanki przepływającej w kroku czasowym przez dowolny plaster kawerny była mniejsza niż objętość tego plastra. Prowadzi to do warunku:

$$\Delta t \leq \frac{V_i}{Q_i} \tag{44}$$

gdzie:

 V_i – objętość *i*-tego plastra [m³],

 Q_i – natężenie przepływu przez *i*-ty plaster [m³/s].

Warunek (44) powinien być spełniony dla każdego plastra. Wystarczy jednak sprawdzić go dla plastrów pomiędzy butem rury wodnej a butem rury solankowej przy obiegu lewym. Pozostałe przepływy są na tyle niewielkie, że nie ograniczają kroku czasowego w sposób istotny, zaś przy obiegu prawym solanka ponad butem rury wodnej ulega wymieszaniu w związku z warunkiem równowagi grawitacyjnej (36)-(37).

Drugi warunek to warunek stabilności szybkości ługowania w pojedynczym kroku czasowym. Wymaga on ograniczenia zmienności stężenia. Można go zapisać następująco:

$$\alpha (C_N - C) \le (C_N - C') \le (C_N - \alpha C)$$
(45)

gdzie:

 C_N – stężenie solanki nasyconej [kg/m³],

C, *C*' – stężenie na początku i na końcu kroku czasowego Δt w plastrze zawierającym but rury wodnej[kg/m³],

 α – współczynnik ograniczający, pomiędzy zero a jeden, blisko zera ograniczenie jest słabe, blisko jedynki bardzo silne; w algorytmie UBRO zastosowano 0,5.

Warunek (42), poza szczególnymi przypadkami, wystarczy sprawdzać na poziomie buta rury wodnej, gdzie stężenie jest najniższe a szybkość ługowania największa.

Jeśli posługując się równaniami (33),(34) wyznaczyć C', przyjmując, że dopływ wody jest zerowy a stężenie przepływającej solanki jest nasycone (najgorszy możliwy przypadek) otrzymuje się następujący warunek:

$$\Delta t \leq \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{V}{\pi \Delta h}} \left(\sqrt{1 + \frac{(1-\alpha)(C_N - C)}{u - C - (1-\alpha)(C_N - C)}} - 1 \right)$$
(46)

gdzie:

 Δh – krok aproksymacji głębokości [m],

V – objętość plastra na poziomie buta rury wodnej [m³],

 ω – szybkość ługowania w kierunku poziomym na poziomie buta rury wodnej [m/s],

$$u = (1 - p_N)\rho_{ZL} + \left(1 - (1 - p_N)\frac{\rho_{ZL}}{\rho_{SR}}\right)C_N$$

 $p_{\scriptscriptstyle N}$ – udział objętościowy części nierozpuszczalnych w skale solnej,

 $\rho_{_{S\!R}}$ – efektywna gęstość soli w roztworze [kg/m³],

 $\rho_{_{ZL}}$ – gęstość soli w złożu solnym [kg/m³].

Niezależnie od powyższych warunków, w programie UBRO wprowadzono maksymalny krok czasowy, który jest przyjmowany, gdy ograniczenia warunkami (41), (43) są mało istotne.

Podsumowanie:

Jawny schemat sprzężenia czasu i głębokości nakłada ograniczenia na krok czasowy mające zapewnić stabilność obliczeń.

Pierwszy z warunków to warunek Couranta-Friedrichsa--Lewy'ego związany z prędkością przepływu i objętością plastrów.

Drugi z warunków związany jest z szybkością ługowania i wielkością niedosycenia solanki

ALTERNATYWNE MODELE

Oprócz opisanego tu modelu numerycznego istnieją alternatywne modele, różniące się w niektórych elementach.

Najbardziej rzucający się w oczy jest opis konturu kawerny przy pomocy promieni ekwiwalentnych plastrów aproksymacyjnych. Wprowadzony przez Saberiana, stosowany w programie SALGAS (Saberian 1984) i programach pochodnych, jak włoska CAVITA oraz w SANSMIC (Russo 1981).



Ryc. 16. Aproksymacja kształtu komory przez promienie ekwiwalentne w plastrach

— kontur kawerny, — kontur promieni ekwiwalentnych,
--- podział na plastry, -- → promienie ekwiwalentne plastrów
Fig. 16. Approximation of the cavern shape by equivalent radia of the cavern slices

cavern contour, contour created by equivalent radia, -- *division onto slices,* $-- \rightarrow$ *equivalent radia of the slices*

Przedstawia to Ryc. 16. W porównaniu z aproksymacją niezależną od podziału na plastry (por. Ryc. 5) kształt kawerny wyznaczony przez promienie ekwiwalentne jest mniej dokładny. Przede wszystkim często kąt nachylenia ociosu nie jest właściwie oddany, a przemieszczenia następują horyzontalnie, w obrębie plastra. W efekcie odcinek stropowy nie wędruje w górę, ale zwiększa promień plastra w którym się znajduje, co z kolei zmniejsza promień plastra poniżej itd. Równy początkowo ocios staje się zębaty.



Ryc. 17. Rozwój kształtu kawerny – porównanie programów Ubro i SANSMIC Fig. 17. Cavern shape development – comparison of Ubro and SANSMIC software

Bardzo dobitnie ilustruje to Ryc. 17 (Kunstman, Urbańczyk 1997). Pokazuje rozwój kawerny, w której po wyługowaniu wrębu w obiegu prawym nastąpiło ługowanie 70-metrowej wysokości stopnia metodą zbliżonych butów rur. Rezultaty programu SANSMIC pokazują dwie główne wady tego modelu: strop wrębu nie powędrował do góry po przejściu na metodę zbliżonych butów rur, zamiast tego pojawiły się "zęby".

Jest jeszcze różnica w kształcie wrębu, wywołana tym, że w programie SANSMIC części nierozpuszczalne osiadają na dnie kawerny dopiero, gdy wydajność przepływu spadnie do zera. Wydaje się jednak, że bliższe prawdy jest założenie, że osiadają szybko, w ciągu pojedynczego kroku czasowego. We wczesnym stadium rozwoju kawerny, gdy prędkość przepływu jest wysoka, cząstki nierozpuszczalne małych rozmiarów mogą pozostawać zawieszone w solance i razem z nią wypływać z kawerny. Dotyczy to jednak jedynie pierwszych dni ługowania kawerny.

Symulacje dwóch rzeczywistych procesów ługowania kawern przeprowadzone pod auspicjami SMRI pokazały, że SALGAS i SANSMIC nie oddają poprawnie rozwoju kształtu kawerny (Charnavel, Eyermann 2008).

Podobna aproksymacja została zastosowana przez Gaz de France, w programie INVDIR (van Vliet 1990), a później Simless (Charnavel&Lubin 2002). Udało się tam jednak wprowadzić procedurę kompensującą powyższe efekty, dzięki której kształt kawerny rozwija się poprawnie. W strefach, gdzie zmiana promienia kawerny jest znaczna, wprowadza się lokalne zagęszczenia podziału aproksymacyjnego. Przypuszczalnie (algorytm nie jest dokładnie opisany), gdy strefa przemieści się wyżej, powrót do niezagęszczonego podziału wygładza zakłócenia.

Oprócz algorytmu opartego na modelu jednowymiarowym, istnieją inne podejścia. Jedno z nich możnaby nazwać podwójnym modelem jednowymiarowym. W modelu tym, powyżej buta rury wodnej zachodzą dwa przepływy jednowymiarowe. Jeden to strumień nisko stężonej solanki, wokół rur ługowniczych w górę, drugi - strumień solanki o wyższym stężeniu, obok ociosu kawerny w dół. Między nimi dochodzi do mieszania, w efekcie stężenia stopniowo się wyrównują i rozdział na dwa strumienie ustaje, chyba, że strop kawerny znajdzie się po drodze. Jeden z takich algorytmów opracował Ahmed Saberian na podstawie eksperymentów laboratoryjnych na uniwersytecie w Austin i zastosował w programie SALGAS (Saberian 1984). Inny algorytm oparty na analogii z termodynamiką wokół płomienia stworzył Anthony J. Russo z Sandia Laboratories i użył w programie SANSMIC (Russo 1981). Nie wprowadził warunku równowagi grawitacyjnej, który zastąpił dość skomplikowaną dyfuzją. O ile kod źródłowy programu SALGAS jest opublikowany, o tyle opisy SANSMIC sa niejednoznaczne i trudno ocenić poprawność założeń i algorytmu. W każdym razie algorytmy mieszania solanki w kawernie, jak w programie SALGAS albo w programie SANSMIC rezultaty dają gorsze niż UBRO, czy PROSACAV (Charnavel &Eyermann 2008).

Co do programów zawierających algorytm z trójwymiarową hydrodynamiką (np. Nolen i in. 1974, Kretzschmar&Heidenreich 1978, Kapaтыгин 1994), autor wypowiedział się w poprzedniej publikacji (Urbańczyk 2017). Programy takie, o ile ich równania są poprawnie zaproksymowane, nie powinny działać.

Jeśli idzie o weryfikację programów przez porównanie z rzeczywistym ługowaniem, to jedynie trzy programy przeszły ją pozytywnie WinUbro, SIMLESS i PROSACAV. SALGAS i SANSMIC dają wyniki poprawne jedynie w ograniczonej klasie przypadków (Charnavel&Eyermann 2008). Jeśli idzie o inne programy, autorzy ich nie przystąpili do weryfikacji.

Jak wspomniano, nie udało się dotąd znaleźć takiego opisu kształtu kawerny, który umożliwiałby objęcie nim kominów, kieszeni, bocznych wnęk. Problem wynika z liniowości elementów użytych w opisie (fragmenty prostych lub płaszczyzn). Otóż przy takim opisie pojawiają się przecięcia w niefizycznych punktach (por. Ryc. 11) i brak jest kryteriów pozwalających odróżnić je od faktycznych kominów i kieszeni. Dlatego też próba opisu rozwoju kominów i kieszeni przy użyciu trójkatów i czworościanów (Edler i in. 2008) nie mogła przynieść pozytywnych efektów. Warto zauważyć, że im "dokładniejsza" jest aproksymacja kształtu, tym więcej pojawi się odcinków o nieznacznie różnym nachyleniu i tym więcej pojawi się przecięć w punktach niefizycznych. Konieczne byłoby albo użycie wielomianów, albo wprowadzenie dodatkowego parametru. W każdym przypadku pociąga to za sobą znaczne komplikacje modelu.

Podsumowanie:

Główne różnice między proponowanymi modelami polegają na:

Innym opisie kształtu kawerny – poprzez wartości ekwiwalentnych promieni plastrów. Ma on dwie wady – brak ługowania stropowego i niestabilność ociosu poniżej dawnego stropu (staje się "zębaty"). W programach INVDIR i SIMLESS udało się wprowadzić procedurę kompensującą te wady. Programy SALGAS i SANSMIC jej nie mają.

Innym opisie hydrodynamiki w kawernie – poprzez dwa strumienie – wznoszący wzdłuż rur i opadający wzdłuż ścian, między którymi zachodzi mieszanie. Programy SALGAS i SAN-SMIC, w których tego typu opis zaimplementowano, nie dają lepszych wyników, niż algorytm UBRO.

WNIOSKI KOŃCOWE

Opisany model z hydrodynamiką 1D jest zaimplementowany w różnych wersjach programu UBRO a podobny model w programie PROSACAV.

Model jest opisany we współrzędnych cylindrycznych. Własności górotworu i stan kawerny są w modelu zależne od głębokości i zadane w plastrach aproksymacyjnych, współczynniki ługowania dodatkowo są zróżnicowane po sektorach azymutalnych.

Kształt kawerny musi być opisany niezależnie od plastrów aproksymacyjnych. W modelu opisuje go promień, jako funkcja głębokości i azymutu. Aproksymacja polega na przybliżeniu półprofilu w każdym z sektorów łamaną, która w kolejnych krokach czasowych podlega przemieszczeniom zależnym od szybkości ługowania.

W krokach czasowych, mając nowe objętości plastrów kawerny, określa się ilość soli wyługowanej i uwolnionych części nierozpuszczalnych, a następnie rozwiązując równania bilansu soli i bilansu objętości otrzymuje nowy rozkład stężenia. Przyjęty opis kształtu kawerny nie dopuszcza kominów, kieszeni ani bocznych wnęk, nie udało się jednak zaproponować lepszego opisu.

Wprowadzanie komplikacji do hydrodynamiki 1D nie prowadzi do lepszych rezultatów.

SUMMARY

Mathematical and physical model described in the previous paper (Urbanczyk 2017) can be solved by numerical methods after discretization. A cylindrical coordinate system is used– radius, azimuth and depth. The model is independent of radial distance so radius can be not discretized. Azimuth is divided into equal azimuthal sectors. Depth is divided by a regular approximation step into depth-slices of the rock-massif and cavern.

Leaching coefficients of the rock salt can be defined in slices and sectors, insoluble content only in slices. Cavern state is defined as distribution of brine concentration in the slices and brine flow between the slices. Cavern hydrodynamics is one-dimensional.

Cavern shape is described in the form of radius being a function of depth and azimuth. With such an approach, chimneys, pockets or side branch of the cavern cannot be modelled – cf. Fig. 1. Cavern shape is approximated by the set of semi-profiles in azimuthal sectors.

Simulation of leaching process consists of time-steps. Generally, the time step is realised as follows. Based on the concentration distribution in the cavern slices, leaching rate distribution is obtained. Consequently, the cavern semi-profiles in all sectors are accordingly displaced and a new cavern shape is obtained. Once the new shape is known, the volumes of the cavern slices and their increase within the time step can be calculated. Based on increases of the cavern slice volumes and the injection rate, the balance equation can be solved and new concentration distribution obtained (Fig. 2).

The cavern shape is approximated as follows: In each horizontal section of the cavern, the cavern contour is replaced by set of equivalent radii in cavern sectors (Fig. 3). Surface of the cavern section is not changed in the above method as well as the cavern volume. The reverse procedure is described (2)-(9), but the recovered cavern contour can differ from the original, some part of information is lost during approximation (Fig. 4).

Approximation of the cavern semi-profile in a sector is independent of depth slices. The broken line (open polygon) is used (Fig. 5). Its sections differ in length, their number and position varies in time. During a single time step, the straight lines defined by the sections of the contour broken lines are appropriately displaced and their crossing points become new nodes of the new broken line (Fig. 8). If leaching rate is the same along the section, it is displaced parallelly (21)-(23). If the section contains exactly two whole slices with different leaching rates, it is displaced according to (24)-(25) as shown in Fig. 6. If the section contains three to five whole slices, it is displaced according to the least square method (26)-(27) (Fig. 7).

In certain cases, (Fig. 9, Fig. 10, Fig. 11 and Fig. 12) a new section must be added into the cavern semi-profile. In other cases (Fig. 13, Fig. 14 and Fig. 15) certain section disappears from the semi-profile.

By comparing the new cavern shape and the old one, it is possible to calculate amount of salt dissolved in every slice and amount of insoluble freed from the salt massif, which create source term for the balance equations. To solve the set of balance equation (33) (34) the rate of injection is also needed and boundary conditions at the cavern roof and sump (39)-(41). The last procedure is to verify the gravity equilibrium condition and eliminate possible inversion zones.

In this way, the new concentration distribution is obtained and the next time step can start.

The explicit coupling of time with depth approximation is applied. Balance equation is approximated upwind. Time step must satisfy two limits to guarantee stability of calculations. There are the Courant-Friedrichs-Lewy condition (44) and the limit on unsaturation decrease (46).

An alternative approach to approximate the cavern semiprofile consists in using of equivalent radii of cavern depth cells (Fig. 16). However, leaching of an old flat roof does not occur in this approach and the cavern wall below it becomes unstable (some teeth can appear) cf. Fig. 17. INVDIR and SIM-LESS software contain; a procedure which compensates the above effects, but there is no such procedure in SALGAS and SANSMIC.

Alternative hydrodynamics was also proposed and implemented in software. According to this approach, two streams occur in the cavern: one along the leaching tubings, another one downwards, along the cavern wall. Mixing of the brine occurs between them. Different mixing mechanism were proposed for SALGAS and for SANSMIC. However, this such additional complexity does not improve the results.

LITERATURA/REFERENCES

- CHARNAVEL Y., EYERMANN T., 2008. SalGas Validation and Benchmark. *SMRI Fall 2008 Technical Conference* Austin, Texas, USA.
- CHARNAVEL Y., LUBIN N., 2002. Insoluble Deposit in Salt Cavern – Test Case – SMRI Fall 2002 Technical Conference, Bad Ischl, Austria
- EDLER D., 1997, Ankieta dla Technical Class podczas Konferencji Technicznej SMRI w Krakowie (niepublikowana).

- EDLER D., BEHR A., KÖCKRITZ V., 2008. On an attempt to simulate the development of fingers and pockets in 3D solution mining modelling using a triangulated cavern surface. *SMRI Fall 2008 Technical Conference* Austin, Texas, USA.
- КАРАТЫГИН Е.П., КУБЛАНОВ А.В., ПУСТЫЛЬНИКОВ Л.М., ЧАНЦЕВ В.П., 1994. Подземное растворение соляных залежей (проблемы, моделирование, управление). Санкт-Петербург, Гидрометеоиздат.
- KRETZSCHMAR H.-J., HEIDENREICH H., 1978. Stromungsmechanisch-matematischen Solmodell f
 ür untertagige Losungsprozesse. Neue Bergbautechnik 11 (1978), 94-99
- KUNSTMAN A., URBAŃCZYK K., 1984. Komputerowy model procesu ługowania podziemnych kawern w złożach soli. Sympozjum Górnictwo Surowców Chemicznych - Zbiorniki Podziemne - Środowisko Naturalne, Kraków, wyd. AGH, 267-279.
- KUNSTMAN A.S., URBAŃCZYK K.M., 1990. Ubro a Computer Model for Designing Salt Cavern Leaching Process - Developed at Chemkop, SMRI Fall 1990 Meeting, Paris October 1990.
- KUNSTMAN A., URBAŃCZYK K., 1994a. The new UBRO version - leaching simulation code for asymmetrical caverns - result of applying to a Mogilno gas cavern. SMRI Fall 1994 Meeting Hannover, pp. 451-486
- KUNSTMAN A., URBAŃCZYK K., 1994b. Nowa wersja UBRO
 program symulujący ługowanie w komorach asymetrycznych
 rezultaty zastosowania dla komory zbiornikowej w Mogilnie. *Prz.Górn.* 10 (1994) 52-59
- KUNSTMAN A.S., URBAŃCZYK K.M., 1997. Computer Modelling of Salt Cavern Leaching Process. Manual of SMRI Spring 1997 Technical Class, Cracow.
- KUNSTMAN A., URBAŃCZYK K., 2000. Computer Models of the Salt Cavern Leaching Process - Evolution Over the Last 35 Years. 8th World Salt Symposium, The Hague 2000, V. 1, p. 279, Wyd. Elsevier
- KUNSTMAN A., POBORSKA-MŁYNARSKA K., URBAŃCZYK K., 2004. Zarys otworowego górnictwa solnego. Wyd. AGH, Kraków
- KUNSTMAN A., POBORSKA-MŁYNARSKA K., URBAŃCZYK K., 2007. Solution mining in Salt Deposits. Wyd. AGH, Kraków.
- NOLEN J.S., VON HANTLEMAN G., MEISTER S., KLEINITZ W., HIEBLINGER J., 1974. Numerical Simulation of the Solution Mining Process. European Spring Meeting of SPE(AIME) Amsterdam, May 1974.
- POTTER D., 1977. Metody obliczeniowe fizyki, PWN, Warszawa 1977
- RUSSO A. J., 1981. A solution mining code for studying axisymmetric salt cavern formation. *Sandia Report* SAND81-1231, (1981) 1-32
- SABERIAN A., 1984. SALGAS User's Manual, Volume 1 Theories, Formulas & Program Description. SMRI Research Project Report No. 84-003-SMRI, 1984.
- URBAŃCZYK K., 2017. Matematyczno-fizyczny opis procesu ługowania (Proces ługowania kawern solnych cz. II). Przegląd Solny / Salt Review, 13 (2017) 47-66
- VAN VLIET L.J.J., 1990. *INVDIR: Comparison of INVDIR Results* with Field Data - SMRI Fall 1990 Meeting Paper, Paris France.