

В.И. Дмитриев, А.А. Канцель, Е.С. Куркина

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ИНФИЛЬТРАЦИОННОГО МЕТАСОМАТОЗА В
ПОРИСТОЙ СРЕДЕ**

Введение

Метасоматическими называются процессы изменения химического состава горной породы, совершающиеся посредством замещения одних минералов другими. Замещение совершается при участии поровых растворов, которые растворяют одни минералы и немедленно отлагают другие, так что в целом порода сохраняет твердое состояние. В метасоматических горных породах часто наблюдается ярко выраженная зональность с резкими границами зон разного минерального состава. Теория метасоматической зональности была разработана акад. Д.С. Коржинским в середине прошлого века [1]. Она объяснила механизм разрастания зон в течение одного метасоматического процесса. До этого считалось, что разные зоны появлялись в разное время в результате разных метасоматических процессов.

Метасоматоз бывает диффузионный и инфильтрационный. При чисто диффузионном метасоматозе перенос вещества осуществляется медленно посредством диффузии через застойные поровые растворы. Обычно его действие проявляется на расстояниях нескольких метров в зоне циркуляции растворов.

При инфильтрационном метасоматозе компоненты переносятся течением водных растворов, просачивающихся через поры горных пород. Инфильтрационные метасоматические процессы могут захватывать многокилометровые толщи горных пород. В природе инфильтрационные процессы всегда сочетаются с диффузионными. Растворы просачиваются вдоль стыков зерен или обтекают отдельные более плотные участки породы, тогда как замещение этих зерен и участков породы происходит в результате диффузии компонентов.

Метасоматоз используется при добычи полезных ископаемых способом подземного выщелачивания (СПВ), который является одним из наиболее экологически чистых и распространенных геотехнологических методов добычи [2]. Он заключается в том, что в подземный рудоносный пласт из ряда скважин закачивается кислотный или щелочной раствор. Раствор, просачиваясь сквозь пористую среду, растворяет минералы

полезных ископаемых и, дойдя до откачных скважин, откачивается. СПВ может быть применен только в том случае, если рудоносный пласт представлен водопроницаемыми породами и обводнен, а полезные компоненты в руде представлены минералами, легко растворимыми слабыми водными растворами кислот или солей щелочных металлов. Наиболее благоприятным для применения СПВ является преимущественно кварцевый состав рудовмещающих пород с низким содержанием вредных примесей и преобладанием полезных компонентов в минеральных формах. По степени проницаемости наиболее пригодными для подземного выщелачивания являются однородные (до 75%) водоносные горизонты, представленные породами с коэффициентом фильтрации 1.0 м/сут и более. Хорошо, когда проницаемость руды больше или равна проницаемости породы. Неблагоприятными для СПВ являются месторождения, в которых руды сосредоточены в слабопроницаемых породах окруженных хорошо проницаемыми безрудными песками. В этом случае рабочие растворы фильтруются по пустым породам в обход рудных тел.

В работе [3] предложена и исследована новая математическая модель метасоматоза учитывающая процессы фильтрации раствора в пористой среде и процессы растворения минерала по мере движения раствора. Показано, что модель отражает все самые существенные черты процессов выщелачивания полезных ископаемых серноокислыми растворами. Получены автомодельные решения, описывающие движение переднего фронта раствора, выдавливающего естественные воды, и заднего фронта, описывающего смещение области активного растворения и разрастание области полного выщелачивания.

Однако, при подземном выщелачивании извлекаемый минерал не только растворяется, но может и частично осаждаться, что существенно искажает первоначальную картину распределения запасов, продуктивности и степени извлечения его из недр. Обычно осаждение происходит в зонах с пониженным значением кислотности (рН), образующихся в результате наличия температурных градиентов или градиентов кристаллизационного давления.

В настоящей работе строится математическая модель, описывающая процессы растворения и переотложения в среде с неоднородным распределением кислотности. Исследуется динамика извлечения полезного ископаемого из продуктивных растворов. Показано, что в процессе фильтрации растворов в зонах с пониженным значением кислотности происходит отложение, и концентрация полезного минерала в твердой фазе в этих зонах увеличивается, в то время как в зонах с повышенным содержанием рН, происходит растворение минерала.

Процесс вторичного отложения идет до тех пор, пока зона полного выщелачивания не достигнет зоны пониженного значения рН. Чем ближе находится эта зона к откачивающей скважине, тем выше вероятность того, что зона полного выщелачивания не успеет разрастись до зоны с пониженным содержанием рН за время отработки рудного пласта. В этом случае в пласте могут остаться более или менее значительные запасы полезного минерала, определяемые объемом зоны с пониженным содержанием рН. В работе на модельных примерах производится оценка оставшихся запасов полезного минерала в руде.

I. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ИНФИЛЬТРАЦИОННОГО МЕТАСОМАТОЗА В ОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ

1. Будем считать, что в пласте песков, сквозь которые сочится раствор, руда находится в виде небольших зерен, равномерно распределенных по всему объему. Рассмотрим случай чисто инфильтрационного метасоматоза, когда растворенные минералы перемещаются только течением раствора, а диффузионным перемещением как более медленным можно пренебречь. Система пор, через которые просачивается раствор, достаточно тонкая, так что раствором омывается каждое зерно.

Хотя любой метасоматический процесс в целом необратим и неравновесен, однако он допускает локальное равновесие и некоторые равновесные соотношения [1], [2]. Будем считать, что скорость фильтрации раствора мала по сравнению со скоростями растворения и осаждения минерала, так что в каждой точке успевает установиться локальное термодинамическое равновесие. Это означает, при фильтрации чистого раствора сквозь пористую среду, концентрация в растворе быстро достигает насыщения; и растворение идет только вблизи границы с чистым раствором или на границах зон с разными минеральными составами. Будем также предполагать, что пористость и коэффициенты инфильтрационного эффекта с расстоянием не изменяются, а замещение идет с сохранением объема.

Рассмотрим сечение единичной площади, перпендикулярное к потоку растворов. Тогда, согласно Коржинскому [1] система уравнений, описывающих процессы метасоматоза, имеет вид:

$$\frac{\partial P_i}{\partial v} + \sigma \frac{\partial C_i}{\partial v} = -\varphi_i \frac{\partial C_i}{\partial x}, \quad i = 1, \dots, k, \quad (1)$$

где P_i – содержание компонента i в минералах единицы объема породы, C_i – концентрация компонента i в растворе, v – объем просочившегося

раствора через сечение, расположенное в точке x , σ – пористость породы, φ_i – фильтрационный эффект ($\varphi_i = V_i/V$, V – скорость фильтрации раствора, V_i – растворителя). Так как выполняются условия термодинамического равновесия, то функции $P_i(x, v)$ и $C_i(x, v)$ не являются независимыми и связаны k уравнениями функциональной связи:

$$C_i = f_i(P_1, \dots, P_k), \quad i = 1, \dots, k \quad (2)$$

Когда пористость породы незначительна и членом σC_i можно пренебречь, система (1) упрощается и приобретает вид:

$$\frac{\partial P_i}{\partial v} = -\varphi_i \frac{\partial C_i}{\partial x}, \quad i = 1, \dots, k. \quad (3)$$

Если пористость не меняется, а именно этот случай мы и рассматриваем, тогда просочившийся через единичное сечение в точке x объем пропорционален времени $v = Vt$, и мы получаем другую форму уравнения (3):

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} + V_i \frac{\partial C_i}{\partial x} = 0, \quad i = 1, \dots, k. \quad (4)$$

Найдем решение системы (3) или (4) в случае, когда раствор подается в сечение $x = 0$ и течет с постоянной скоростью в положительном направлении оси x . Пусть начальные и граничные условия имеют вид:

$$\begin{aligned} P_i(0, x) = P_i^0 = \text{const}, \quad v = 0 \quad (t = 0), \quad x > 0 \\ C_i(v, 0) = C_i^0 = \text{const}, \quad v > 0 \quad (t > 0), \quad x = 0 \end{aligned}, \quad i = 1, \dots, k \quad (5)$$

В этом случае задача (4) (5) имеет автомодельное решение, зависящее от одной переменной $u = x/t$. Действительно,

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = \frac{dP_i}{du} \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{u}{t} \frac{dP_i}{du}; \quad \frac{\partial C_i}{\partial x} = \frac{dC_i}{du} \frac{1}{t}, \quad i = 1, \dots, k$$

а уравнение (4) приобретает вид:

$$u \frac{dP_i}{du} - V_i \frac{dC_i}{du} = 0, \quad i = 1, \dots, k \quad (6)$$

Граничные условия (5) выразятся через новую переменную:

$$P_i = P_i^0 \quad \text{при } u = \infty; \quad C_i = C_i^0 \quad \text{при } u = 0. \quad (7)$$

Сечение с данным значением $u = \bar{u}$ обладает постоянной скоростью продвижения $\frac{dx}{dt}$, так как

$$du = d \frac{x}{t} = \frac{tdx - xdt}{t^2} = 0; \text{ отсюда следует: } \frac{dx}{dt} = \frac{x}{t} = \bar{u}. \quad (8)$$

Каждому значению $u = \bar{u}$ соответствует определенный состав породы и определенная насыщенная концентрация порового раствора, которые не изменяются при перемещении этого сечения с постоянной скоростью. Если порода представлена несколькими минеральными составами, то разрастание ее зон в процессе фильтрации не сопровождается изменением их состава, и каждый фронт замещения движется со своей скоростью. Из уравнения (6) следует:

$$u = V_1 \frac{dC_1}{du} / \frac{dP_1}{du} = \dots = V_k \frac{dC_k}{du} / \frac{dP_k}{du} = \frac{x}{t}. \quad (9)$$

На диаграмме $x-t$ линии постоянного состава с $\{P_i\}$ и $\{C_i\}$ инфильтрационных метасоматических зон и фронтов замещения выразятся прямыми лучами, исходящими изначала координат (см. рис. 1).

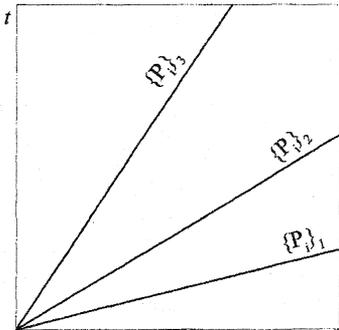


Рис. 1. Линии фронтов замещения

2. Рассмотрим теперь подробнее уравнение (1). В работе [4] была разработана модель, описывающая объемное растворение одного минерала $i=1$ (например, соли урана), то есть, найдена зависимость $\partial P / \partial t$ и связь $C = f(P)$. В основе этой модели лежит система уравнений метасоматоза, которая описывает изменение концентрации растворенного вещества $0 \leq c(x,t) \leq C_n$ в жидкой фазе и радиуса зерна выпелачиваемого минерала $0 \leq \rho(x,t) \leq 1$ в твердой фазе:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + V \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} = \frac{\bar{\alpha}}{\sigma} \rho^2 (C_n - c), \quad (10)$$

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = -\beta (C_n - c), \quad 0 < x < l(t), \quad t > 0. \quad (11)$$

где $\bar{\alpha} = \frac{3\alpha \cdot \delta}{r_0}$, $\beta = \frac{\alpha}{r_0 C_p}$, α - коэффициент растворения, зависящий от состава раствора, температуры и других характеристик, r_0 - средний радиус зерна минерала в руде, σ - пористость, δ - доля зерен в единице объема, C_p - концентрация минерала в твердой фазе до начала процесса подземного выщелачивания.

Система уравнений (10), (11) дополняется следующими граничными и начальными условиями:

$$\begin{aligned} c(0,t) &= 0 \quad \text{при } t \geq 0; \\ c(x,0) &= C_0, \quad \rho(x,0) = 1 \quad \text{при } x > 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь считается, что раствор подается в сечение $x=0$ и течет с постоянной скоростью V в положительном направлении оси x , $l(t)$ - координата сечения переднего фронта раствора, выдавливающего естественные грунтовые воды ($l(t) \leq L$), L - координата откачивающей скважины, $C_0 \approx 0$ - фоновая концентрация.

Задача (10),(11),(12) была подробно исследована в [4]. С помощью аналитических методов были найдены автомодельные решения, описывающие движение переднего и заднего фронтов растворения. Также были проведены численные расчеты задачи и выяснены основные закономерности процесса растворения и движения границы зоны полного выщелачивания. Показано, что данная модель хорошо описывает экспериментальные данные. В частности, линейную зависимость скорости V_p движения фронта зоны полного выщелачивания от скорости фильтрации:

$$V_p = \frac{V}{1 + \frac{\alpha}{3\beta}} = \frac{V}{1 + \frac{\delta \cdot c_p}{\sigma \cdot c_n}}; \quad (13)$$

наличие четырех зон по длине фильтрационного потока: зоны полного выщелачивания, зоны активного выщелачивания, зоны насыщенного раствора, в которой в природной неоднородной среде происходят периодические переотложения минерала, и зоны движения переднего фронта. На рис. 2 показано распределение концентрации растворенного вещества вдоль потока (в зависимости от значения x/V) для нескольких

моментов времени, и отмечены указанные выше зоны для последнего профиля.

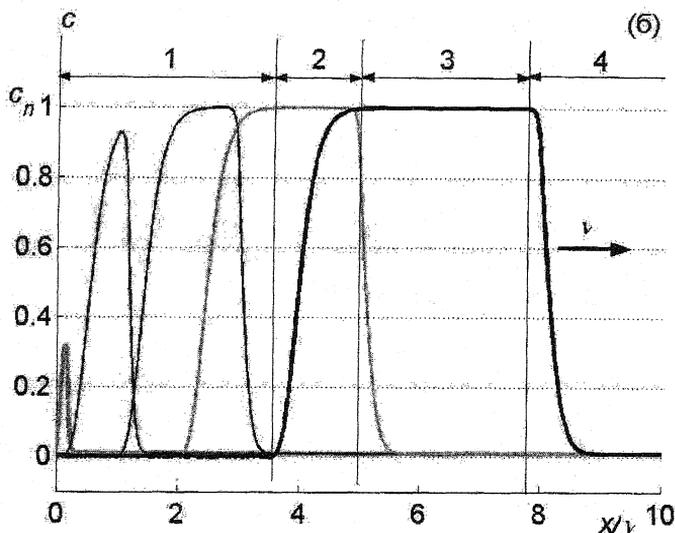


Рис. 2

II. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МЕТАСОМАТОЗА В НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ (НАЛИЧИЕ ОБЛАСТИ С ПОНИЖЕННОЙ КИСЛОТНОСТЬЮ)

Теперь рассмотрим случай, когда падение температуры и давления вдоль потока растворов существенно изменяет растворимость минералов. В частности, падение давления с приближением пласта к поверхности может вызвать дегазацию растворов, в особенности потерю ими CO_2 , что может существенно отразиться на растворимости некоторых минералов. Поскольку градиенты температуры и давления вызывают аналогичные явления зональности, в модели мы будем характеризовать их влияние единым образом, считая, что кислотность растворов pH , определяющая растворение неоднородна вдоль течения. А именно, будем рассматривать случай, когда на отрезке $(0 \leq x \leq L)$ между закачной и откачной скважинами имеется зона $(x_1 \leq x \leq x_2)$ с пониженным значением pH , в которой предельная (насыщенная) концентрация растворенного минерала существенно меньше, чем во всей остальной области:

$$C_n = \begin{cases} C_1, & x \notin [x_1, x_2], \\ C_2, & x \in [x_1, x_2], \end{cases} \quad C_2 < C_1 \quad (14)$$

Кроме того, естественно предположить, что наличие зоны с пониженным содержанием рН, обусловлено природным ландшафтом, и эта зона существовала, когда формировалось месторождение. Так что, вероятно в этом месте в далеком прошлом, когда шли геологические процессы, больше отложилось минералов, чем в соседних местах, где значение рН было выше. В модели этот факт отразится в том, что δ_2 – доля зерен в единице объема на отрезке $[x_1, x_2]$, будет больше, чем доля δ_1 на всем остальном отрезке.

$$\delta = \begin{cases} \delta_1, & x \notin [x_1, x_2], \\ \delta_2, & x \in [x_1, x_2], \end{cases} \quad \delta_2 > \delta_1 \quad (15)$$

Итак, рассмотрим, как будет происходить процесс в среде с переменной кислотностью. Сначала прокачки чистого раствора сквозь пористую среду процесс растворения идет быстро, и концентрация в движущемся растворе быстро достигает насыщенной, равной C_1 . Как только концентрация достигла насыщения, процесс растворения прекращается. Однако, когда раствор достигает зоны с пониженной кислотностью, в которой концентрация C_2 насыщения меньше чем концентрация в растворе C_1 , пойдет процесс отложения. Будем считать, что в процессе отложения будет происходить рост имеющихся зерен минерала. Однако, рост зерен будет ограничен, так как вызовет незначительное уменьшение пористости (закупорку просветов), и давление в растворе резко возрастет из-за не сжимаемости жидкости. Таким образом, рост зерна в данном месте будет происходить до тех пор, пока увеличение давления в растворе не будет препятствовать отложению. В модели этот факт будет учитываться тем, что радиус шарика при отложении будет расти не больше чем на 15 - 20 процентов от первоначального размера. Таким образом, в процессе подземного выщелачивания *в зонах с пониженным значением рН происходит не растворение, а вторичное отложение полезного минерала!*

Со временем, как было показано ранее, вблизи закачной скважины образуется зона полного растворения, которая смещается со скоростью несколько меньшей, чем скорость фильтрации жидкости [4]. В зоне полного растворения фильтруется чистый раствор, поэтому, когда зона полного растворения дойдет до зоны с пониженным значением рН, начнется растворение и в этой зоне. Понятно, что чем ближе зона пониженной кислотности находится к откачной скважине, тем больше отложится минерала в этой зоне, и тем меньше вероятность, что зона полного выщелачивания успеет дойти до зоны с пониженным значением рН за время обработки пласта.

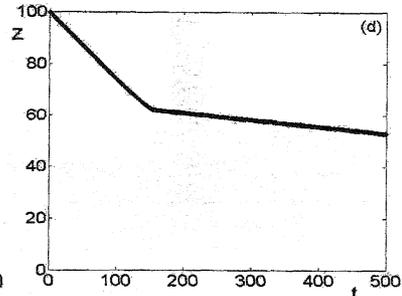
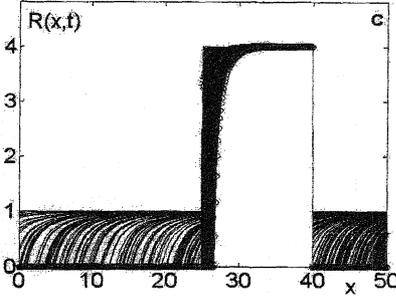
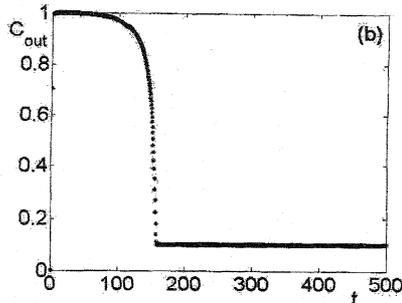
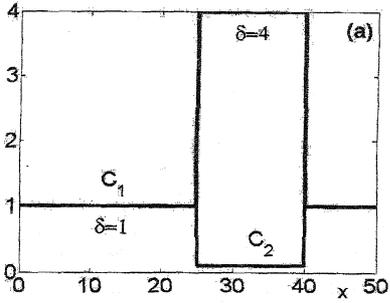
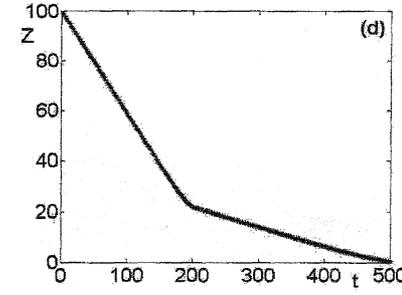
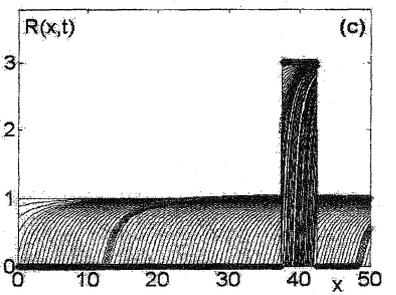
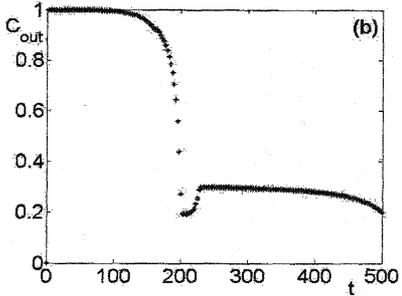
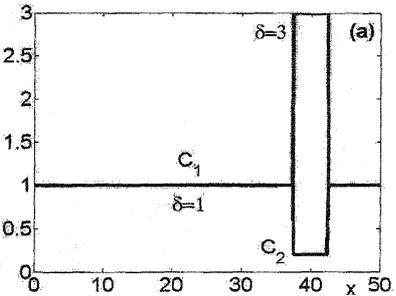


Рис. 3 (вверху).

Рис. 4 (внизу)



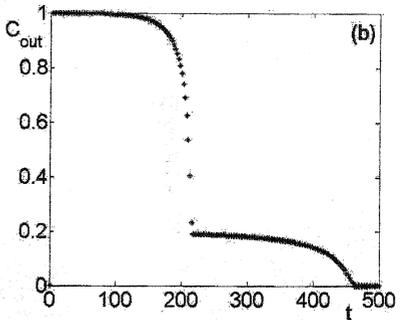
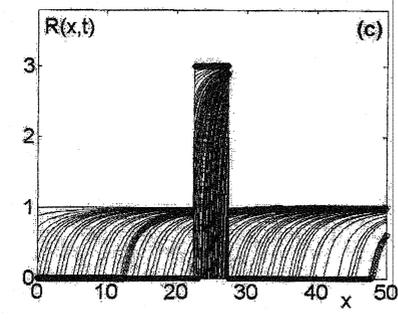
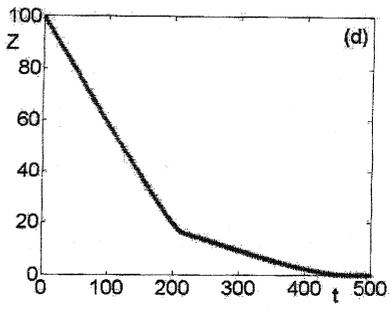
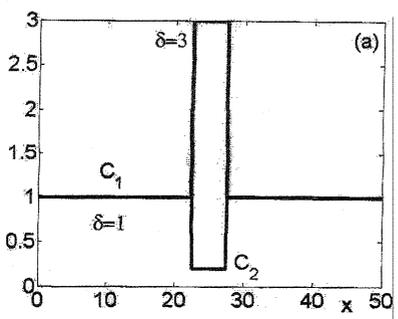
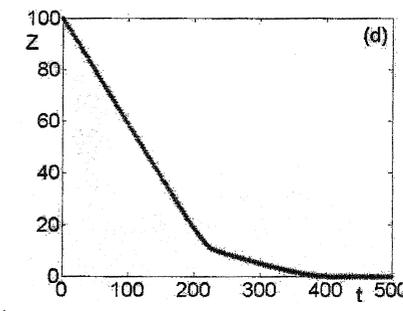
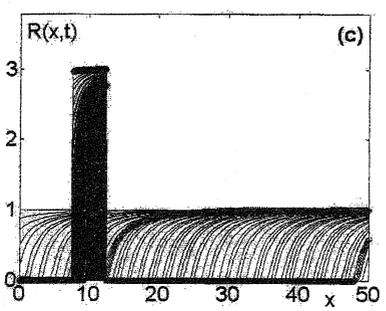
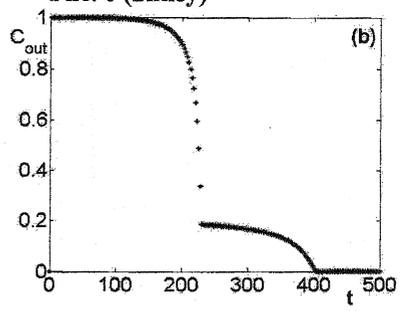
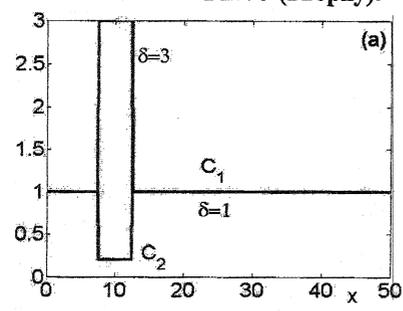


Рис. 5 (вверху).

Рис. 6 (внизу)



На следующих рисунках (3-6) представлены расчеты одномерной задачи для четырех разных случаев, отличающихся расположением и размером отрезка $[x_1, x_2]$, а также соотношением концентраций C_1 и C_2 . Каждый случай характеризуют четыре графика (a), (b), (c), (d). На первом графике (a) представлены начальные распределения насыщенной концентрации $C(x)$ (14) и залежей полезного минерала $\delta(x)$ (15) вдоль потока. Этот график показывает местоположение и размер зоны с пониженным значением рН, а также ее характеристики по отношению к остальной области. На остальных графиках представлена динамика извлечения из недр. На графике (b) показана зависимость от времени значения концентрации извлекаемого минерала в откачиваемом растворе на выходе, а на графике (c) изображены профили распределения убывающей массы полезного минерала в пласте в разные моменты времени в процессе выщелачивания (некоторые профили выделены маркерами). График (d) показывает, как уменьшаются суммарные запасы полезного минерала в твердой фазе (в процентах).

В первом случае (см. рис. 3) зона пониженного значения рН имеет большие размеры, находится ближе к откачной скважине и характеризуется низким значением насыщенной концентрации $C_2 = 0.1 * C_1$ (см. рис.3а). Из рис. 3б видно, что сначала вначале процесс растворения идет в первой области 1, которая характеризуется насыщенной концентрацией C_1 , а процесс отложения идет в области 2 с C_2 . Когда зона полного выщелачивания с $C=0$ доходит до области 2, в области 2 успели накопиться значительные вторичные отложения минерала. Теперь начинается процесс растворения в этой области; он идет медленней и требует существенно большего расхода растворителя, поскольку насыщенная концентрация быстро здесь быстро достигает значения C_2 . Процессы растворения идут и в области 3, поскольку в эту область растворы приходят с концентрацией C_2 , а здесь насыщенная концентрация равны существенно выше - C_1 . Когда зона активного выщелачивания достигнет откачной скважины, начинается падение выходной концентрации минерала в растворе (см. график (б)). После того, как полностью растворился минерал в 3-ей области, все запасы остались в области с пониженным рН. Теперь медленное растворение идет только в этой области и характеризуется на выходе концентрацией C_2 . Обычно процесс выщелачивания заканчивается, когда происходит заметное снижение концентрации минерала на выходе; в рассматриваемом случае это соответствует моменту времени 160 (см. рис, 3(б)). Рис. 3(d) показывает, что при этом в пласте остаются значительные запасы

полезного ископаемого (60%), и все они сосредоточены в зоне с пониженным значением рН 2.

Аналогичная ситуация имеет место и во втором случае (см. рис. 4), где область с пониженным значением рН значительно меньше, чем в первом случае, но тоже расположена близко к откачной скважине. Здесь в области 2 могут остаться более 20% запасов (хотя она составляет 0.1 часть всей длины участка L), если отключить прокачку растворов в момент времени 200.

В третьем случае (см. рис. 5) область 2 по своим характеристикам такая же, как и во втором случае, только расположена в середине участка. В этом случае тоже в земле могут остаться заметные запасы, около 20% (см. рис. 5 (б) и 5 (d)).

В последнем рассматриваемом случае зона с пониженным рН находится близко к закачной скважине. Поэтому за время процесса прокачки растворов здесь успевает раствориться большая часть запасов. Однако и в этом случае в земле может остаться более 10% запасов.

III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена математическая модель процессов подземного выщелачивания. Она описывает фильтрацию растворов в пористой среде, процессы растворения и переотложения минерала. Исследована динамика извлечения полезного ископаемого из продуктивных растворов в среде с неоднородным распределением кислотности. Показано, что в процессе фильтрации растворов в зонах с пониженным значением кислотности происходит отложение, и концентрация полезного минерала в твердой фазе в этих зонах увеличивается, в то время как в зонах с повышенным содержанием рН, происходит растворение минерала. В этом случае в пласте могут остаться более или менее значительные запасы полезного минерала, в зависимости от объема зоны с пониженным содержанием рН и близости ее к откачной скважине.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Д.С. Коржинский* Теория метасоматической зональности. – М.: Наука, 1969, 112с.
2. Справочник по геотехнологии урана// В.И. Белецкий, Л.К. Богатков, Н.И. Волков и др.; Под ред. Д.И. Скороварова. – М.: Энергоатомиздат, 1997, 672 с.
3. *Е.А. Толстов, Д.Е. Толстов* Физико-химические геотехнологии. Освоения месторождений урана и золота в кызылкумском регионе. – М.: Геоинформцентр, 2002, 277 с.
4. *А.А. Канцель, Е.С. Куркина* Моделирование процессов растворения в фильтрационном потоке жидкости //Прикладная математика и информатика: Труды факультета ВмиК МГУ им. М.В. Ломоносова. М.:МАКС Пресс, 2005, № 21, С. 30-47.