

Dynamika frontów reakcji w ośrodkach porowatych

Paweł Kondratiuk

Streszczenie

Typowym przykładem ośrodka porowatego są skały oraz gleby. Są one zbudowane ze szkieletu stałego oraz sieci pustych przestrzeni — porów. W dostatecznie porowatych skałach pory tworzą spójną sieć, co sprawia, że skała może być infiltrowana przez ciecz, np. wody gruntowe. Ciecz taka, wnikając do skały, wytrąca ją przeważnie ze stanu równowagi chemicznej. Powrót do równowagi chemicznej wiąże się ze zmianą składu chemicznego skały — część zawartych w niej minerałów może się rozpuścić, mogą również osadzić się nowe minerały. Jeśli infiltracja cieczy zachodzi w sposób ciągły, ostatecznie tworzy się front reakcji — obszar o podwyższonej aktywności chemicznej, oddzielający części skały o różnych składach chemicznych, tj. skałę pierwotną i przeobrażoną. W szczególności, porowatość (oraz przepuszczalność, która jest m.in. funkcją porowatości) skały przeobrażonej może być inna niż pierwotnej. Front reakcji przemieszcza się i ewoluuje w miarę nadpływania nowej cieczy. W przypadku skomplikowanych układów frontów reakcji może być więcej niż jeden.

Dynamika frontów reakcji jest przeważnie skomplikowana na skutek dodatnich sprzężeń zwrotnych między przepływem cieczy, transportem rozpuszczonych w niej składników, oraz zmianami przepuszczalności pod wpływem rozpuszczania i osadzania minerałów. W swojej rozprawie doktorskiej zbadałem wybrane aspekty dynamiki frontów reakcji dla dwóch klas modelowych układów hydrogeochemicznych: rozpuszczeniowych i rozpuszczeniowo-osadzeniowych. Dynamika tych układów była analizowana na skałach długości istotnie większych niż typowe rozmiary porów, oraz na skałach czasu związanych ze zmianami składu skały w wyniku reakcji chemicznych. Stąd ośrodki porowate modelowane były jako ośrodek ciągły, a przepływ jako przepływ Darcy’ego.

Jako pierwsze rozważane były układy rozpuszczeniowe. Na początku wykonana została liniowa analiza stabilności jednowymiarowego frontu rozpuszczeniowego. Pokazano, że taki front jest zawsze niestabilny względem długofalowych zaburzeń; zaburzenia krótkofalowe są natomiast stabilizowane przez dyfuzję. Wynik ten, znany od lat 80. XX wieku, służył jako wprowadzenie do dalszej analizy. Następnie przeprowadzona została słabo nieliniowa analiza stabilności frontu. W zastosowanym przybliżeniu analizowane było sprzężenie między dwoma trybami harmonicznymi: trybem, który w liniowej analizie stabilności dominuje, oraz jego pierwszą subharmoniką. Analiza ta pozwoliła zaobserwować pierwsze efekty związane z nieliniowościami w modelu: rywalizację między tworzącymi się palcami rozpuszczeniowymi. Pełna dynamika rozpuszczania pod wpływem infiltracji była też badana metodą symulacji numerycznych, co pozwoliło zaobserwować dwa zjawiska, które są kluczowe dla dynamiki tego typu układów w jej późnych stadiach: łączenie i ekranowanie palców rozpuszczeniowych. Na koniec postawiony został problem znalezienia geometrii dwóch klas form rozpuszczeniowych, “czubków” i “korzeni” palców rozpuszczeniowych. Założone zostało, że formy te w miarę upływu czasu dążą do pewnego stanu stacjonarnego, i właśnie w takim stanie analizowana była ich geometria. W obu przypadkach niezmienniczo propagujące się formy okazały się mieć kształt parabol (w dwóch wymiarach) bądź paraboloid (w trzech wymiarach). Znaleziony został przepływ oraz stężenie reaktanta w okolicach stacjonarnych “czubków” i “korzeni”, jak również prędkość ich propagacji.

W podobny sposób analizowane były układy, w których infiltracja cieczą reaktywną wywołuje zarówno rozpuszczanie jak i osadzanie minerałów. Po przeanalizowaniu jednowymiarowych profili frontów reakcji, przeprowadzona została analiza ich stabilności. Pokazano, że takie fronty są niestabilne dla szerokiego zakresu parametrów kontrolnych. Najmniej oczywistym wynikiem była możliwość zaistnienia niestabilności w przypadku, gdy przepuszczalność skały wtórnej jest mniejsza niż przepuszczalność skały pierwotnej. Za niestabilność tego typu frontów odpowiada niemonotoniczność jednowymiarowego profilu przepuszczalności, która to osiąga minimum w okolicy frontu. Następnie zaprezentowane zostały wyniki symulacji numerycznych, które pozwalają na przeanalizowanie pełnej, nieliniowej dynamiki układu. Jeśli skała wtórna jest bardziej przepuszczalna niż pierwotna, ewolucja układu przebiega podobnie jak przy samym rozpuszczaniu. Niestabilność frontu powoduje złamanie jego symetrii translacyjnej oraz wytworzenie się łańcucha

palców “rozpuszczeniowo-osadzeniowych”. W trakcie dalszej ewolucji układu istotne stają się nieliniowe sprzężenia, w wyniku których palce łączą się, a dłuższe ekranują krótsze. Są też jednak istotne różnice między układem rozpuszczeniowo-osadzeniowym a rozpuszczeniowym. Po pierwsze, porowatość pozostaje minimalna w okolicach frontu reakcji. Po drugie, osadzanie nie zachodzi jednorodnie. Jego rozkład odzwierciedla historię ewolucji układu. W szczególności, zawartość minerału wtórnego jest stosunkowo niska na trajektoriach czubków palców. Zauważono, że analogiczne zachowanie obserwuje się w niektórych rzeczywistych układach geologicznych, a mianowicie w przypadku dolomityzacji, która jest właśnie przykładem procesu, w którym pod wpływem infiltracji zachodzi rozpuszczanie minerału skały pierwotnej (kalcytu) i osadzaniem nowego (dolomitu). Jeśli natomiast skała wtórna jest mniej przepuszczalna niż skała pierwotna, front reakcji również jest niestabilny dla szerokiego spektrum parametrów kontrolnych. Jednak w tym przypadku nie wytwarzają się wielkoskalowe palce.

Modele rozważane w niniejszej rozprawie są stosunkowo proste, co sprawia, że dają się zastosować do wielu procesów geologicznych. Z drugiej strony, są wystarczająco skomplikowane, by wykazywać nietrywialne i intrygujące zachowanie, które ciężko byłoby wydedukować a priori.