

# 堆浸工艺中流动-反应-变形-传质 耦合过程数值模拟及应用\*

吴爱祥<sup>1,2</sup>, 刘金枝<sup>2</sup>, 唐玲艳<sup>3</sup>

(1. 北京科技大学 土木与环境工程学院, 北京 100083;

2. 中南大学 数学科学与计算技术学院, 长沙 410075;

3. 国防科技大学 数学与系统科学系, 长沙 410078)

(郭兴明推荐)

**摘要:** 基于堆浸过程中的孔隙变形, 发展了一孔隙发育模型, 并建立了堆浸工艺中流动-反应-变形-传质全耦合模型控制方程组, 在喷淋强度不变和常水头的的情况下, 给出了方程的数值解. 数值结果描述了浸出过程矿堆中溶浸液饱和度的分布、溶浸剂浓度和浸出矿石浓度的分布, 拟合结果表明: 有用矿物浸出百分比与浸出时间之间呈 3 次关系, 这一关系可用来预测堆浸中的有用金属的浸出回收率.

**关键词:** 堆浸; 孔隙发育; 饱和度; 传质; 数值解

**中图分类号:** TD953      **文献标识码:** A

## 引 言

溶浸采矿是通过注入某些化学溶剂, 以溶解矿石或矿床中有用成分的采矿方法, 一般采用原地浸出和堆浸两种形式. 其中堆浸技术以其工艺简单、投资少、见效快、管理简单等诸多优点而被广泛应用于从低品位矿石中提取有用金属<sup>[1-3]</sup>. 堆浸过程中, 由于目的金属与注入溶浸剂之间的化学或生化反应, 以及目的金属的溶解/沉淀, 导致多孔介质的机械变形<sup>[4,6]</sup>.

近年来, 对堆浸工艺的理论研究越来越引起人们的重视, 特别是关于堆浸过程的建模, 其中发展了一些用来描述堆浸过程的数学模型. Sheikhzadeh 等基于液相质量守恒原理建立了描述矿床和矿石颗粒中液体流动的二维非稳态模型<sup>[7]</sup>, 用全隐式有限差分法数值求解模型方程组, 数值结果给出了溶浸液的饱和度分布及垂直向下的流速分布. Bouffard 和 Dixon 对堆浸过程中的水动力学行为进行了深入的研究<sup>[8]</sup>, 他们用无量纲的形式推导了 3 个数学模型来模拟非饱和矿堆中溶质通过流动区和滞留区的运移. Sidbom 等建立了硫化铜矿床中的二维动力

\* 收稿日期: 2006-08-09; 修订日期: 2006-12-28

基金项目: 国家(重点)基础研究发展规划资助项目(2004CB619206); 国家杰出青年基金资助项目(50325415); 国家创新群体基金资助项目(50321402); 湖南省自然科学基金资助项目(06JJ30024)

作者简介: 吴爱祥(1963-), 男, 湖北仙桃人, 教授, 博士, 博士生导师;  
刘金枝(1971-), 女, 湖南益阳人, 副教授, 博士(联系人. Tel: + 86-731-2656845; E-mail: liu0619@mail.csu.edu.cn).

学模型<sup>[9]</sup>,并用 FEMLAB 软件进行数值模拟,模拟结果描述了铜的浸出过程中各影响因素随时间的变化情况.吴爱祥等建立了堆浸过程中溶质运移的基本方程,在喷淋强度小的条件下,忽略对流迁移的影响,给出了方程的解析解,并由此确定了水动力弥散系数<sup>[10]</sup>.

以上所讨论的模型注重于堆浸过程中的水动力学行为及稳态流条件下的化学反应和溶质运移问题,而没有考虑由于溶浸剂与矿石之间发生化学反应而导致的机械变形.本文将在已有研究成果的基础上,考虑堆浸过程中的变形因素,发展一孔隙发育模型,并建立堆浸过程中流动-反应-变形-传质全耦合模型控制方程组.在喷淋强度不变和常水头的情况下,给出了一个一维情形的数值算例,数值结果给出了浸出过程中孔隙率的分布、矿堆中溶浸液饱和度的分布、溶浸剂浓度和浸出矿石浓度的分布,探明了有用矿石浸出百分比与浸出时间的关系.

## 1 流动-反应-变形-传质全耦合模型控制方程

### 1.1 孔隙发育模型

假设矿石颗粒中的反应锋面随时间而向内部推进,反应区中的有用金属全部浸出,且表征单元体(REV)<sup>[11]</sup>内的矿岩散体介质骨架不会因浸出而垮塌(见图1).此时孔隙率的改变量可用下式表示为:

$$\Delta\theta = \theta - \theta_0 = \sum_{i=1}^N G_{Vi} \frac{(4/3)\pi a_i^3 - (4/3)\pi r_i^3}{(4/3)\pi a_i^3} = \sum_{i=1}^N G_{Vi} \left[ 1 - \frac{r_i^3}{a_i^3} \right], \quad (1)$$

其中:  $N$  为单元体中颗粒个数;  $a_i$  为浸出前颗粒的半径;  $r_i$  为未反应核的半径;  $G_{Vi}$  为单颗粒中目的金属的体积比;  $\theta$  为动态有效孔隙率;  $\theta_0$  为初始孔隙率.

对于自然状态下的多孔介质,其中颗粒的形状和粒径分布是不均匀的,但为了理论研究的方便,此处采用空间平均的概念<sup>[8]</sup>.设颗粒粒径一致,反应均匀:  $a_i = a, r_i = r$ ,则方程(1)变形为:

$$\Delta\theta = \theta - \theta_0 = G_V \left[ 1 - \frac{r^3}{a^3} \right], \quad (2)$$

其中:  $G_V = \sum_{i=1}^N G_{Vi}$  为整个单元体中目的金属所占体积比.

因矿物反应绝大多数受矿岩表面和溶浸剂浓度控制,因此可定义反应速率为与反应前后颗粒的表面积之比和溶浸剂的浓度  $C_1$  的乘积成正比<sup>[12]</sup>:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{r^3}{a^3} \right] = -k \left[ \frac{r^2}{a^2} \right] C_1, \quad (3)$$

其中  $k$  为比例常数.

结合(2)式和(3)式可得孔隙率的发育模型为:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = kG_V \left[ 1 - \frac{(\theta - \theta_0)}{G_V} \right]^{2/3} C_1. \quad (4)$$

令  $\theta_f$  为所有有用金属全部浸出之后介质的孔隙率,显然,  $G_V = \theta_f - \theta_0$ , 方程(4)变形为:

$$\frac{\partial\theta}{\partial t} = kG_V \left[ \frac{\theta_f - \theta}{\theta_f - \theta_0} \right]^{2/3} C_1 = k(G_V)^{1/3} (\theta_f - \theta)^{2/3} C_1. \quad (5)$$

### 1.2 溶浸液在非饱和多孔矿堆中的流动

液体通过非饱和多孔介质流动的质量守恒方程为<sup>[13]</sup>:

$$\frac{\partial(\rho_1 \theta_1)}{\partial t} = -\operatorname{div}(\rho_1 \mathbf{u}) + q, \quad (6)$$

其中:  $\rho_l$  为液体的密度;  $S_1$  为液体的饱和度;  $u$  为液体的表面流速;  $q$  是单位时间内液体的注入量(取“+”)或抽出量(取“-”).

根据 Darcy's 定律, 液体的渗流速度与水力坡度之间的关系为:

$$u = -K(\theta) \cdot \nabla h, \quad (7)$$

其中:  $h$  为液体的压头(liquid pressure);  $K(\theta)$  为有效水力传导系数.

而液体的压头为液体的总水头  $h_1$  与重力水头之差:

$$h = h_1 - z, \quad (8)$$

设液体不可压缩, 将(7)式、(8)式代入(6)式:

$$\frac{\partial(\theta S_1)}{\partial t} = \text{div}(K \cdot \nabla h_1) - \frac{\partial K}{\partial z} + \frac{q}{\rho_l}. \quad (9)$$

为了探明液体的总水头与有效饱和比的关系, Genuchten 提出了一个包含参数的模型-水土保持曲线(SWRC)<sup>[14]</sup>. 根据这个模型:

$$h_1 = (1/\delta)(m^{-1/a} - 1)^{1/b}, \quad (10)$$

其中  $\delta$  和  $b$  为水土保持曲线(SWRC)的形状参数, 可通过实验数据确定,  $a = 1 - 1/b$ .  $m$  为多孔介质的有效饱和比, 通过下式定义:

$$m = \frac{v_l - v_l(0)}{1 - v_s - v_l(0)}, \quad (11)$$

其中:  $v_l$  为液体测定体积比;  $v_l(0)$  为滞留液体测定体积比, 可通过实验测定;  $v_s$  为固体骨架测定体积比.

显然, (11)式可变为:

$$m = \frac{v_l - v_l(0)}{\theta - v_l(0)}, \quad (12)$$

于是, 由(10)式和(12)式可得:

$$\begin{aligned} \therefore h_1 &= \frac{1}{\delta} \frac{1}{b} (m^{-1/a} - 1)^{1/b-1} \left[ -\frac{1}{a} m^{-1/a-1} \cdot \nabla m \right. \\ &\quad \left. \frac{1-a}{a\delta} (1 - m^{1/a})^{-a} m^{-1/a} \cdot \nabla(\theta S_1) \right], \end{aligned} \quad (13)$$

而水力传导系数可表示为孔隙率的函数(Brooks-Corey model)<sup>[15]</sup>:

$$K(\theta) = K_{\text{sat}} m^{1/2} [1 - (1 - m^{1/a})^a]^2, \quad (14)$$

其中  $\alpha$  指数在 3~4 之间取值;  $K_{\text{sat}}$  为饱和水力传导系数, 可表示为介质的固有渗透率、流体粘度和密度的函数<sup>[15]</sup>:

$$K_{\text{sat}} = \frac{k_i \rho_l g}{\mu}, \quad (15)$$

其中:  $\mu$  为流体的动力粘度;  $g$  为重力加速度常数;  $k_i$  为固有渗透率, 可表示为:

$$k_i = \frac{d_p^2}{150} \frac{\theta^3}{(1-\theta)^2}, \quad (16)$$

其中  $d_p$  为平均粒径.

将(15)式、(16)式代入(14)式得:

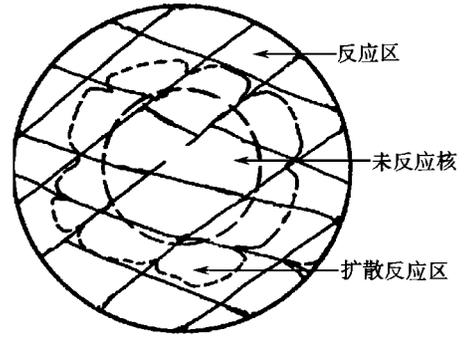


图 1 反应区示意图

$$K(\theta) = \frac{k_i \rho_g}{\mu} m^{1/2} [1 - (1 - m^{1/a})^a]^2 = \frac{d^2 \rho_g}{150 \mu} \frac{\theta^3}{(1 - \theta)^2} \left[ \frac{\theta S_1 - v_1(0)}{1 - v_s - v_1(0)} \right]^{1/2} \left[ 1 - \left[ 1 - \left( \frac{\theta S_1 - v_1(0)}{1 - v_s - v_1(0)} \right)^{1/a} \right]^a \right]^2. \quad (17)$$

综合以上这些推导, 并将(13)式代入(9)式, 得流体在非饱和多孔介质中的流动-变形耦合方程:

$$\frac{\partial(\theta S_1)}{\partial t} = \operatorname{div}(D_1 \nabla(\theta S_1)) - \frac{\partial K}{\partial z} + \frac{q}{\rho_l}, \quad (18)$$

其中  $K$  由(17)式确定;  $D_1$  为液体的表面扩散系数, 定义为:

$$D_1 = \frac{(1-a)K(\theta)}{a \delta(\theta - v_1(0))} m^{-1/a} (1 - m^{1/a})^{-a}, \quad (19)$$

同时, 结合(7)式、(8)式和(18)式可得液体在矿床中的流速为:

$$\mathbf{u} = -D_1 \nabla(\theta S_1) + K \mathbf{k}. \quad (20)$$

### 1.3 溶质运移

溶质运移方程在许多文献中已有过详细的推导<sup>[16]</sup>, 故这里我们将仅仅写出控制方程而略出其推导过程:

$$\frac{\partial(\theta C_1)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\theta \mathbf{u} C_1 - \theta \mathbf{D} \nabla C_1) - R_1, \quad (21)$$

$$\frac{\partial(\theta C_2)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\theta \mathbf{u} C_2 - \theta \mathbf{D} \nabla C_2) + R_2, \quad (22)$$

其中:  $C_1$ 、 $C_2$  分别为溶浸剂和浸出矿物金属的浓度;  $D$  为水动力弥散系数;  $R_i$  ( $i = 1, 2$ ) 为化学反应速率.

设反应前单个颗粒内目的金属的质量为  $\omega_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ), 则

$$\omega_i = \frac{4}{3} \pi a_i^3 \rho_s G_i,$$

其中  $\rho_s$  为矿石颗粒的密度;  $G_i$  为矿石品位.

则整个单元体内已溶解的矿物质量为:

$$\omega = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{4}{3} \pi a_i^3 - \frac{4}{3} \pi r_i^3 \right] \rho_s G_i = \sum_{i=1}^N \omega_i \left[ 1 - \frac{r_i^3}{a_i^3} \right].$$

设颗粒粒径一致, 反应均匀:  $a_i = a$ ,  $r_i = r$ , 则

$$\omega = \rho_s V G \left[ 1 - \frac{r^3}{a^3} \right],$$

式中:  $V$  为表征单元体体积;  $G$  为单元体中矿石品位.

结合(2)式, 已溶矿物的质量浓度可表示为:

$$C_2 = \frac{\omega}{\rho_l V \theta_0} = \frac{\rho_s G}{\rho_l \theta_0} \left[ 1 - \frac{r^3}{a^3} \right] = \frac{\rho_s}{\rho_l} \left[ \frac{\theta}{\theta_0} - 1 \right].$$

显然, 溶质的浓度与矿石的品位成正比. 将上式关于时间  $t$  求导得反应速率为:

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = \frac{\rho_s}{\rho_l \theta_0} \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{C_{\max}}{G} \frac{\partial \theta}{\partial t},$$

其中  $C_{\max}$  为溶液中有用矿物质量浓度的最大值.

上式即为溶质运移方程的源/汇项. 于是(21)式、(22)式可进一步写为:

$$\frac{\partial(\theta C_1)}{\partial t} = -\nabla \cdot (\theta \mathbf{u} C_1 - \theta \mathbf{D} \nabla C_1) - \beta \frac{C_{\max}}{G} \frac{\partial \theta}{\partial t}, \quad (23)$$

$$\frac{\partial(\theta C_2)}{\partial t} = -\beta(\theta u C_2 - \theta D \nabla \cdot C_2) + \frac{C_{\max}}{G} \frac{\partial \theta}{\partial t}, \quad (24)$$

其中  $\beta$  为化学反应式中反应物的计量系数.

(5) 式、(18) 式、(23) 式、(24) 式即构成堆浸工艺中流动-反应-变形-传质的耦合模型.

## 2 数值算例和结果

考虑一个一维问题. 设矿堆高度为  $H = 2 \text{ m}$ , 从堆顶注入浓度为 1 的溶浸剂, 连续输入时间为 120 h, 喷淋强度为  $W = 2 \times 10^{-6} \text{ m}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$ . 计算区域如图 2 所示.

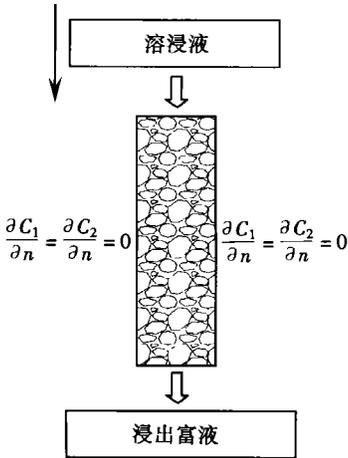


图 2 数值计算区域示意图

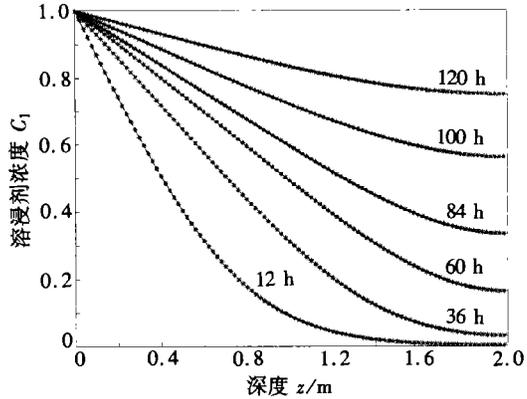


图 3 溶浸剂浓度分布

取初始条件为:

$$S_1(z, 0) = 0.34858, \quad (25)$$

$$\text{I. C1: } C_1(z, 0) = 1, \quad (26)$$

$$\text{I. C2: } C_2(z, 0) = 0. \quad (27)$$

顶部边界条件:

$$\left[ -D_1 \frac{\partial(\theta S_1)}{\partial z} + K \right] \Big|_{z=0} = u, \quad (28)$$

$$\text{B. C1: } C_1(0, t) = 1, \quad (29)$$

$$\text{B. C2: } C_2(0, t) = 0. \quad (30)$$

底部边界条件:

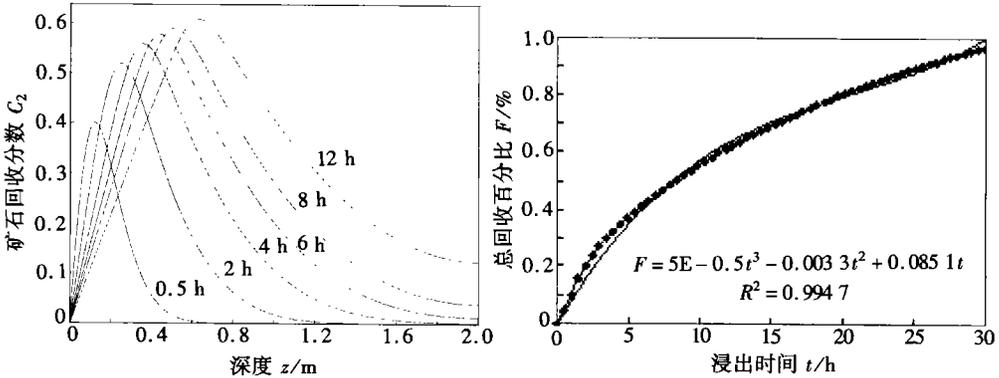
$$\frac{\partial S_1}{\partial z} \Big|_{z=H} = 0, \quad (31)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial z} \Big|_{z=H} = \frac{\partial C_2}{\partial z} \Big|_{z=H} = 0. \quad (32)$$

数值计算时, 设(5)式中的常数:  $k(G_V)^{1/3} = 10$ , 初始孔隙率:  $\theta_0 = 0.30$ , 浸出过程完成之后的孔隙率:  $\theta_f = 0.35$ ; (23) 式中的常数:  $\beta = 1$ . 根据(13)式、(20)式、(23)式、(24)式, 利用差分方法, 采用中心差分格式, 将耦合模型方程组离散, 建立差分方程组<sup>[17]</sup>, 用 Visual Fortran 5.0 语言编程计算.

图 3 为不同的时间区间内溶浸剂浓度随深度的变化曲线, 由此可以看出: 矿堆中溶浸剂的浓度随深度的增加而减小. 这是因为溶浸剂与矿堆中的有用矿物反应, 消耗溶剂的原因.

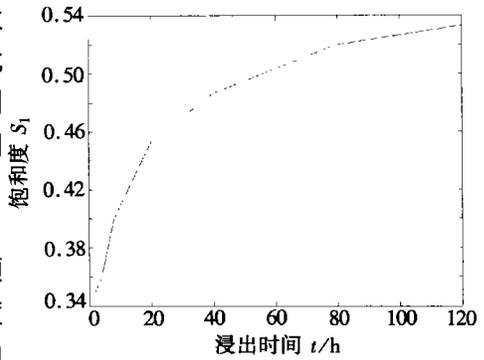
且浸出前期, 溶浸浓度随深度的增加而下降得快; 随着浸出过程的进行, 浓度曲线变得越来越平缓, 这是因为浸出前期, 矿堆中目的金属含量高, 反应快, 溶浸剂的消耗速率快, 到浸出的中后期, 目的金属几乎全部浸出, 对溶浸剂的消耗减少.



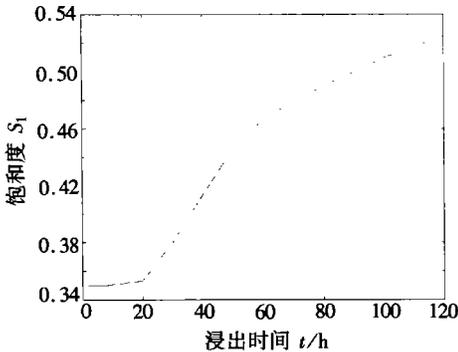
(a) 浸出质量分数随高度的变化 (b) 回收百分比与浸出时间的关系 (实心点代表数值计算结果)

图4 浸出质量分数与总回收百分比的时间和空间分布

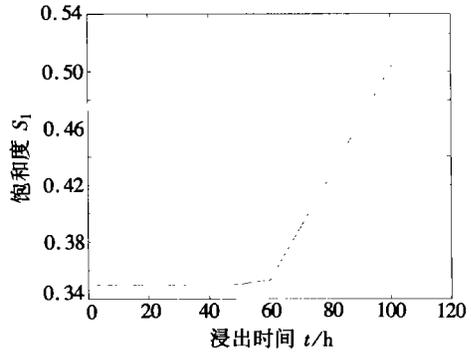
将求得的目的金属浓度  $C_2$  与浸出金属最大浓度  $C_{max}$  相比, 称此比值为浸出质量分数. 用此比值与浸出时间和空间做出曲线, 得到同一时刻在不同位置的浸出质量分数和同一位置处在不同时刻的浸出质量分数 (如图4). 如图4(a)所示: 目的金属的浸出质量分数是位置和时间的函数, 在同一时刻, 有用金属的浸出质量分数在靠近顶端处随深度的增加而上升; 到某一位置处随深度的增加而下降, 且曲线的峰值随时间的增加而向右推移, 这主要与浸出过程前期, 矿堆中的目的金



(a) 顶部



(b) 中部



(c) 底部

图5 浸出过程中饱和度分布

属含量高有关.

在某一给定时刻, 定义分布曲线以下部分的面积与总面积之比为矿石回收百分比, 则该百分比与浸出时间之间的关系如图4(b)所示: 显然, 矿石回收百分比随浸出时间的延长而增

大. 数值结果表明: 矿石回收百分比  $F$  与浸出时间  $t$  之间的关系可用下式描述:

$$F = 5 \times 10^{-5} t^3 - 0.0033 t^2 + 0.0851 t. \quad (33)$$

如图 5 为不同位置处(顶部、中部和底部)饱和度随浸出时间的变化情况. 计算结果表明: 随着浸出过程的进行, 矿堆中饱和度的分布呈上升趋势, 这是因为液体渗透到矿堆中, 从而导致饱和度增大. 我们也发现: 矿堆中饱和度介于两个极限值 0.34 和 0.54 之间, 这一现象依赖于矿堆的高度、矿堆的固有渗透率和喷淋强度等.

### 3 结 论

1) 考虑浸出过程中的机械变形, 发展了一孔隙发育模型, 并基于该模型建立了描述堆浸工艺中流动-反应-变形-传质全耦合系统的控制方程组.

2) 将该耦合模型应用于一维浸出情形, 变形与传质耦合的数值结果表明: 矿石回收百分比与浸出时间之间呈 3 次关系. 这一结果可用来预测较简单情况下有用金属的浸出率.

3) 变形与流动耦合的数值计算结果表明: 连续喷淋时, 矿堆中的饱和度呈上升趋势, 饱和度夹在两个极限值之间.

4) 本文的数值模拟结果与文献<sup>[18]</sup>中的试验结论在总体趋势上基本相符, 这也就表明所建立的数学模型及所采用的数值方法和参数的取值能够较好地描述堆浸场中的多因素耦合过程.

5) 实际堆浸中, 一方面, 矿石颗粒具有不同的形状和粒径; 另一方面, 细颗粒将随流动液体运移, 聚集在矿堆的某些区域内, 从而降低渗透性, 数值计算过程中没法考虑这些影响因素. 因此, 这一建模过程有待进一步完善.

### [参 考 文 献]

- [1] 李壮阔, 桂斌旺, 段希祥. 德兴铜矿堆浸厂的生产实践及技术研究[J]. 矿冶工程, 2002, 22(1): 46-48.
- [2] 刘汉钊, 张永奎. 难处理低品位金矿细菌堆浸的现状和前景[J]. 四川地质学报, 1998, 18(3): 234-240.
- [3] 田原, 关自斌, 高仁喜. 铀、金矿石的堆浸技术进展[J]. 铀矿冶, 1998, 17(2): 121-126.
- [4] Pritzker M D. The role of migration in shrinking-core leaching reactions controlled by pore transport [J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 1994, 26B(4): 901-910.
- [5] Bartlett R W. A combined pore diffusion and chalcocopyrite dissolution kinetics model for in-situ leaching of a fragmented copper porphyry[A]. In: Proceedings of international Symposium on Hydrometallurgy [C]. Teheran: University of Teheran, 1973, 331-374.
- [6] Nguyen V V, Gray W G, Casas J M, et al. A theoretical investigation on the transport of chemicals in reactive porous media[J]. Water Resources Research, 1982, 18(4): 1149-1156.
- [7] Sheikhzadeh G A, Mehrabian A, Mansouri S H, et al. Computational modeling of unsaturated flow of liquid in heap leaching-using the results of column tests to calibrate the model[J]. Heat and Mass Transfer, 2005, 48(6): 279-292.
- [8] Sylvie C Bouffard, David G Dixon. Investigative study into the hydrodynamics of heap leaching processes[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2001, 3: 393-408.
- [9] Sidborn M, Casas J, Martinez J, et al. Two-dimensional dynamic model of copper sulphide ore bed [J]. Hydrometallurgy, 2003, 71(10): 67-74.

- [10] 吴爱祥, 刘金枝, 尹升华, 等. 堆浸工艺中溶质运移的数学模型及其解析解[J]. 矿冶工程, 2005, 5: 7-10.
- [11] Helmig R. Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface: A Contribution to the Modeling of Hydrosystems[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1997.
- [12] Lasaga A C. Chemical kinetics of water-rock interactions[J]. Journal of Geophysical Research, 1984, 89(2): 4009-4025.
- [13] Dullien F A L. Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure [M]. New York: Academic Press, 1979: 123-149.
- [14] Genuchten T Van. A Closed Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils[J]. Soil Sci Am, 1980, 44(5): 892-898.
- [15] Robert W. Bartlett. Solution Mining: Leaching and Fluid Recovery of Minerals [M]. Singapore: Gordon and Breach Science Publisher 1992: 147-186.
- [16] 阙为民, 谭亚辉, 曾毅君. 原地浸出采铀反应动力学与溶质运移[M]. 北京: 原子能出版社, 2002: 192-195.
- [17] Smith G D. Numerical Solution of Partial Differential Equations [M]. London: Oxford University Press, 1965: 17-23.
- [18] 王洪江. 大型矿山排土场细菌强化浸出机理及新工艺研究 [D]. 博士学位论文. 长沙: 中南大学, 2006, 26-46.

## Simulation of Coupled Flowing-Reaction-Deformation With Mass Transfer in Heap Leaching Processes

WU Ai-xiang<sup>1,2</sup>, LIU Jin-zhi<sup>2</sup>, TANG Ling-yan<sup>3</sup>

(1. School of Civil and Environment Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, P. R. China;

2. School of Mathematical Sciences and Computing Technology, Central South University, Changsha 410075, P. R. China;

3. Department of Mathematics and System Science, National University of Defense Technology, Changsha 410078, P. R. China)

**Abstract:** Governing equations for a fully coupled Flowing-Reaction-Deformation behavior with Mass Transfer in heap leaching process were developed. These equations were solved using an explicit finite different method under the conditions of invariable application rate and constant hydraulic head. The distributions of the degree of the saturation as well as the distributions of the concentration of the reagent and the solute was given. A cubic relationship between the mineral recovery and the leaching duration is obtained based on the numerical results. The relationship can be used to predict the recovery percentage of the valuable metal.

**Key words:** heap leaching; porosity evolution model; saturation degree; mass transfer; numerical solution