

# Simulación del Transporte de Trazadores en Medios Porosos: Aplicación al Caso de Arcillas

A. Bru  
D. Casero

32 / 46



ES0100240



MINISTERIO  
DE CIENCIA  
Y TECNOLOGÍA

**Ciemat**

Centro de Investigaciones  
Energéticas, Medioambientales  
y Tecnológicas

Simulación del Transporte de  
Trazadores en Medios Porosos:  
Aplicación al Caso de Arcillas

A. Bru

D. Casero

Toda correspondencia en relación con este trabajo debe dirigirse al Servicio de Información y Documentación, Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas, Ciudad Universitaria, 28040-MADRID, ESPAÑA.

Las solicitudes de ejemplares deben dirigirse a este mismo Servicio.

Los descriptores se han seleccionado del Thesaurus del DOE para describir las materias que contiene este informe con vistas a su recuperación. La catalogación se ha hecho utilizando el documento DOE/TIC-4602 (Rev. 1) Descriptive Cataloguing On-Line, y la clasificación de acuerdo con el documento DOE/TIC.4584-R7 Subject Categories and Scope publicados por el Office of Scientific and Technical Information del Departamento de Energía de los Estados Unidos.

Se autoriza la reproducción de los resúmenes analíticos que aparecen en esta publicación.

Depósito Legal: M-14226-1995  
ISSN: 1135-9420  
NIPO: 402-01-008-3

Editorial CIEMAT

## CLASIFICACIÓN DOE Y DESCRIPTORES

S58

BENTONITE; CLAYS; RADIATION TRANSPORT; POLLUTANTS; RADIONUCLIDE  
MIGRATION; POROSITY; TRACER AMOUNTS.

**Simulación del Transporte de Trazadores en Medios Porosos:  
Aplicación al Caso de Arcillas**

Bru, A.; Casero, D.  
16 pp. 10 figs. 0 refs.

**Resumen**

Presentamos un marco para describir el transporte de trazadores en medios heterogéneos, tales como los medios porosos tales como las bentonitas. En estos medios, la aproximación de campo medio no es válida ya que existen ciertas restricciones geométricas y el transporte es anómalo.

**Simulation of Tracer Transport in Porous Media: Application to Bentonites**

Bru, A.; Casero, D.  
16 pp. 10 figs. 0 refs.

**Abstract**

We present a formal framework to describe tracer transport in heterogeneous media, such as porous media like bentonites. In these media, mean field approximation is not valid because there exist some geometrical constraints and the transport is anomalous.

Los problemas de transporte de partículas reactivas han sido tradicionalmente tratados en términos de la ley de acción de masas. De esta forma, el balance de los productos reaccionantes se lleva a cabo por medio de ecuaciones de reacción difusión en las que los términos de reacción son proporcionales al producto de las densidades de partículas de los elementos reaccionantes. La constante de proporcionalidad juega un importante papel en la teoría. A pesar de que estas teorías han sido muy utilizadas y han tenido gran éxito en la interpretación de multitud de datos experimentales, no están bien justificadas teóricamente y como ha podido comprobarse en los últimos quince años fallan en un gran número de ocasiones. En este informe nos vamos a centrar en una de las razones por las que fallan estas teorías: cuando el transporte es anómalo. Este tipo de comportamientos no puede ser explicado por las teorías clásicas por dos tipos de restricciones: geométricas y que el transporte es anómalo. Como no existe un modelo fiable para este problema, lo que pretendemos es construir uno. El método que presentamos es un método general y se podrá aplicar a muchos tipos de problemas. En concreto se podrá aplicar a los dos que en este informe nos interesan: el transporte en la bentonita de trazadores y el transporte de sales en la misma, considerando la generación y aniquilación de las mismas en el proceso de transporte. Cuando hablamos de aniquilación nos referimos a procesos que eliminan sales del proceso de transporte, como pueden ser fenómenos de absorción, recombinación, intercambio iónico con la matriz de bentonita, ... Intentaremos demostrar cuál es el fenómeno que regula los comportamientos anómalos observados en los procesos de transporte.

El transporte de trazadores en bentonita es altamente dispersivo. El atrapamiento de trazadores se produce durante el proceso de transporte y por lo tanto no valen los modelos clásicos de atrapamiento. Es previsible que el transporte dispersivo suponga una reducción de la tasa de atrapamiento normal, de la misma forma que ocurre en el caso de aniquilación en un medio altamente desordenado.

Este modelo no lo tenemos completamente desarrollado por lo que, por el momento, no vamos a entrar a hacer una descripción profunda de él. Como ejemplos de los resultados que pueden obtenerse con él presentamos los siguientes.

Consideramos  $N$  partículas de un tipo de trazador con un coeficiente de difusión,  $D$ , moviéndose en un campo aleatorio de velocidades con movilidad  $v$ . La aleatoriedad de dicho campo proviene de las características geométricas del medio, la bentonita, es decir, de la gran heterogeneidad en los tamaños de los poros, las distintas morfologías de los mismos y que no todos los puntos de la bentonita son accesibles a los trazadores que se mueven a través de ella. Tenemos que precisar que actualmente cuando consideramos transporte de cualquier tipo de partícula por la arcilla (ya sea trazador o ión salino) suponemos que la arcilla está completamente saturada. Este es un punto muy importante de resaltar por la razón de que se simplifica mucho el problema teórico del tratamiento del transporte de partículas porque la única restricción geométrica a su movimiento viene dada por la morfología del medio y no por la del espacio ocupado por el agua que va variando en el tiempo, menciono aparte del transporte anómalo del agua.

A continuación presentamos el siguiente caso a modo de ejemplo. Vamos a considerar que las partículas se mueven en el medio generado en el capítulo 2 de este informe y que era el mostrado en la figura. Recordamos que este medio ha sido



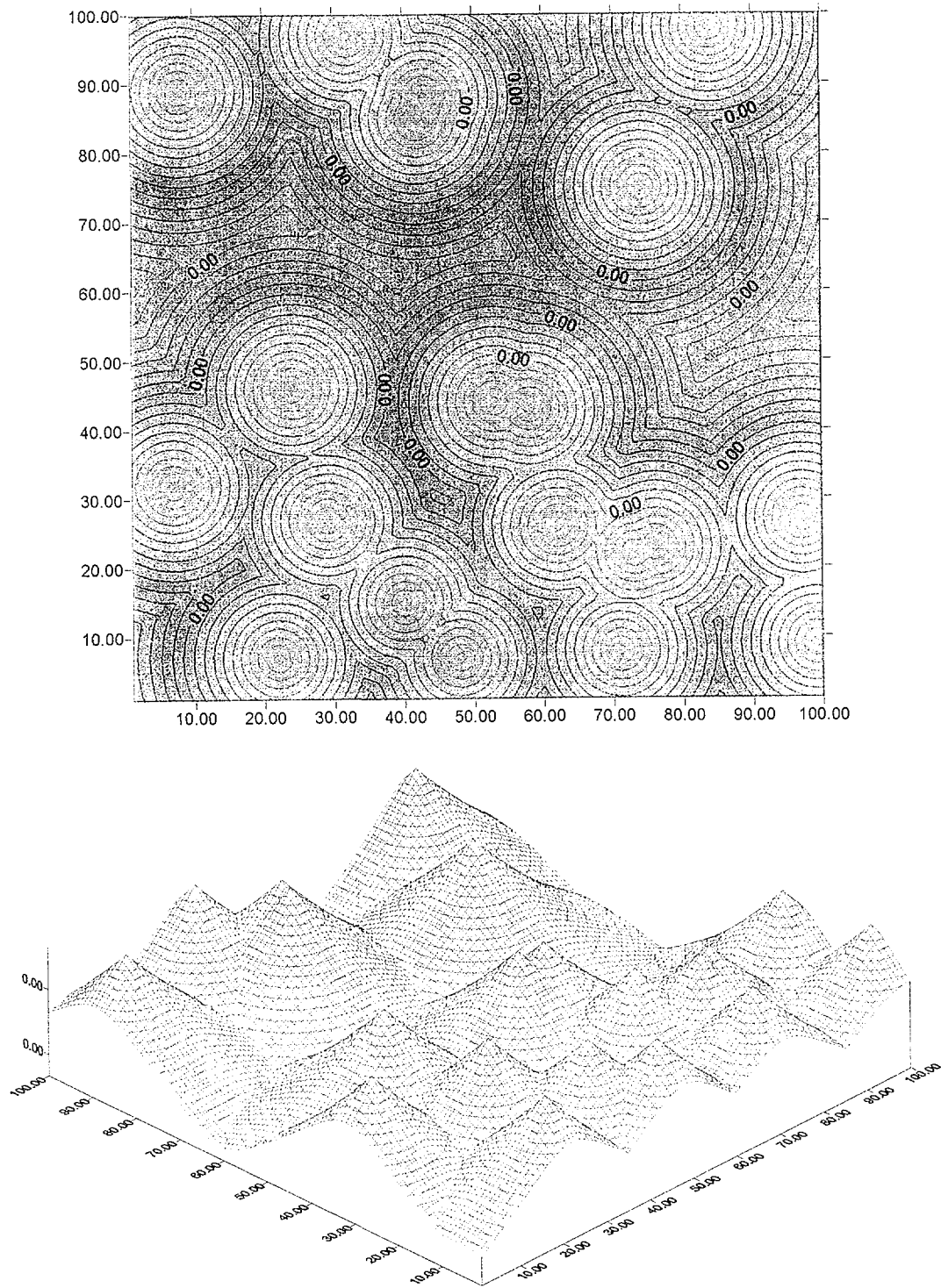
generado considerando un 40% de porosidad y que en dicha figura se representa en oscuro el espacio de poros, es decir, el espacio accesible para las partículas. Consideramos que éstas son conservativas, es decir, que no reaccionan ni entre sí ni con el medio. Posteriormente se tratarán los casos en que no lo sean. Inicialmente consideramos una concentración inicial  $C(x,t=0)$  en una de las caras de la muestra y suponemos que difunden a lo largo de la misma. Cabe mencionar que todos los caminos del espacio de poros los consideramos por el momento equiprobables ya que todavía no hemos introducido en el medio ninguna condición que aluda a los tamaños de poros. Cuando lo hagamos, parte de esos caminos no contribuirán al transporte debido a la imposibilidad física de que partículas de un determinado tamaño pasen por ellos. Esta

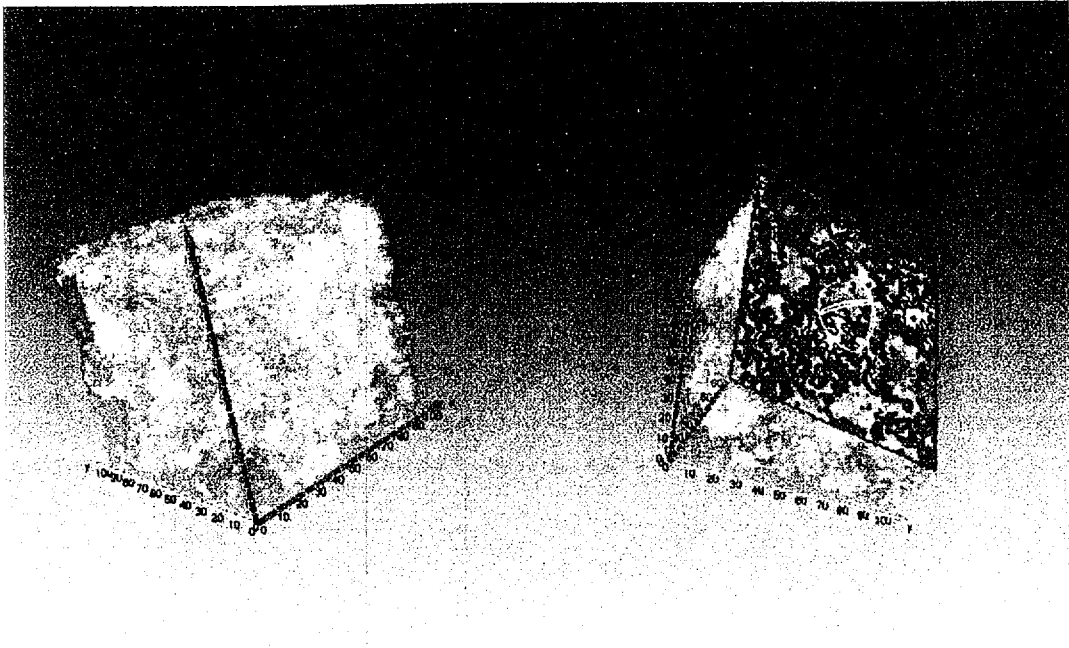


será la forma de introducir en un futuro cercano el atrapamiento de un trazador conservativo.

Generamos un autómata celular en el que las partículas se mueven en el campo de movilidades que se ilustra en la siguiente figura.

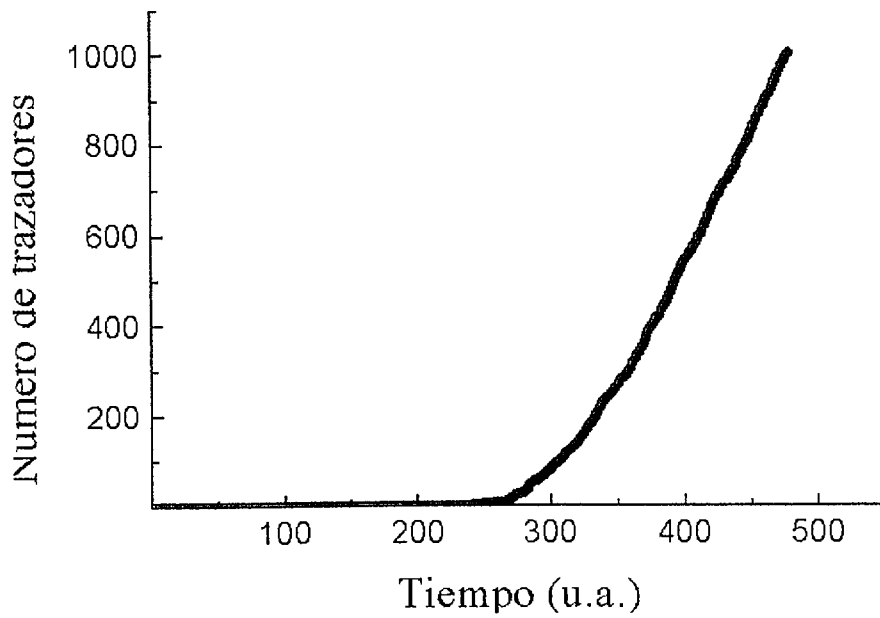
Que se genera teniendo en cuenta que la distribución de los tamaños de poro en la arcilla cumple una ley de potencias, como aparece en la siguiente figura.

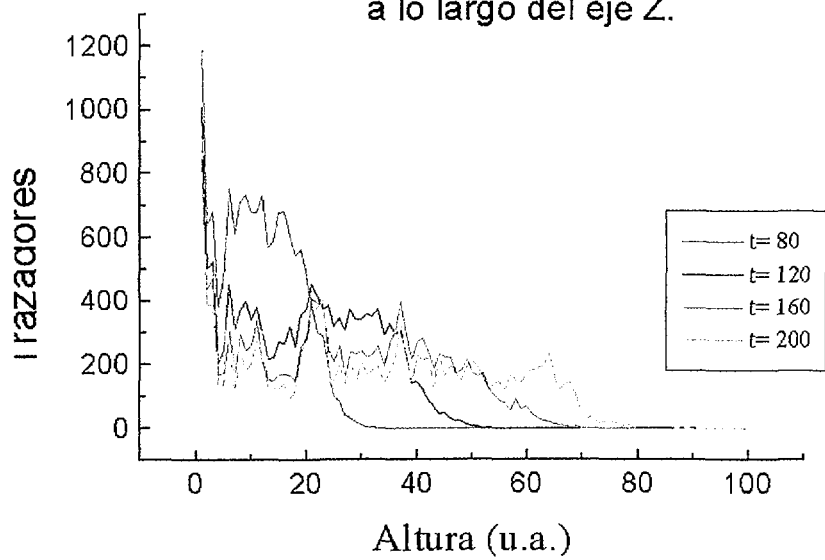
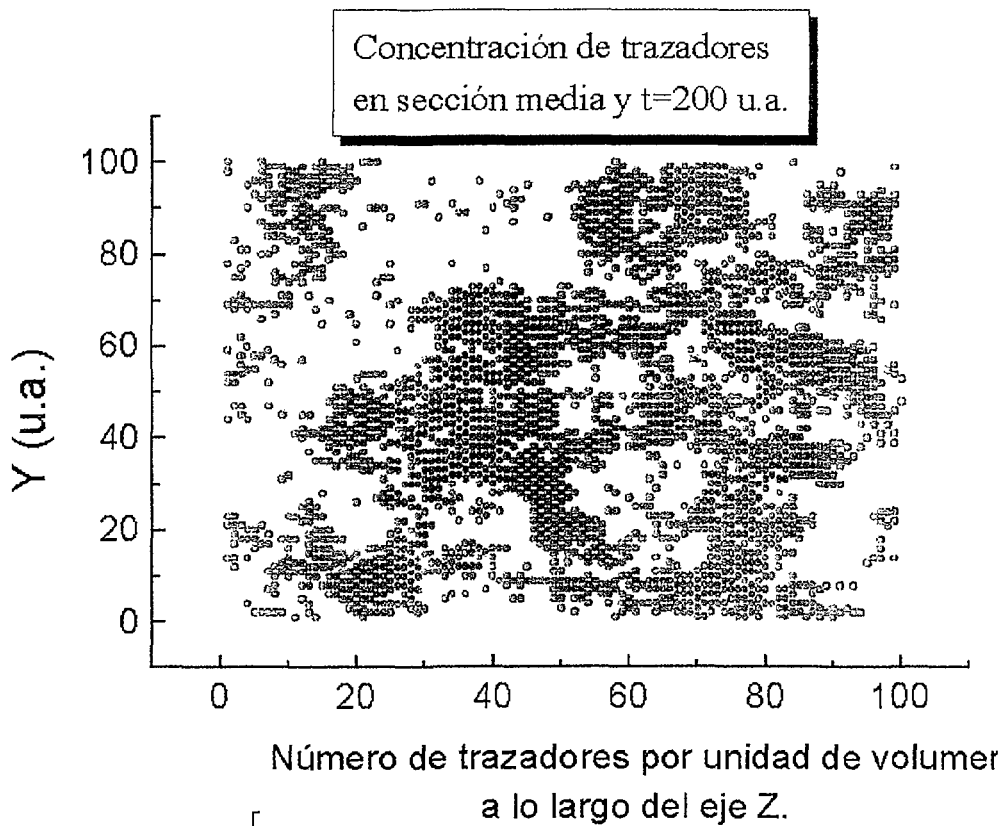




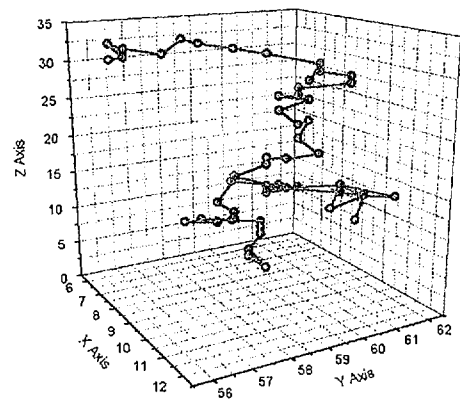
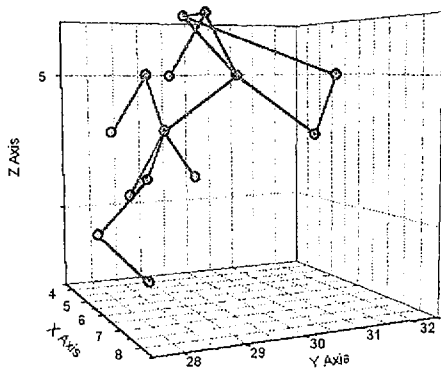
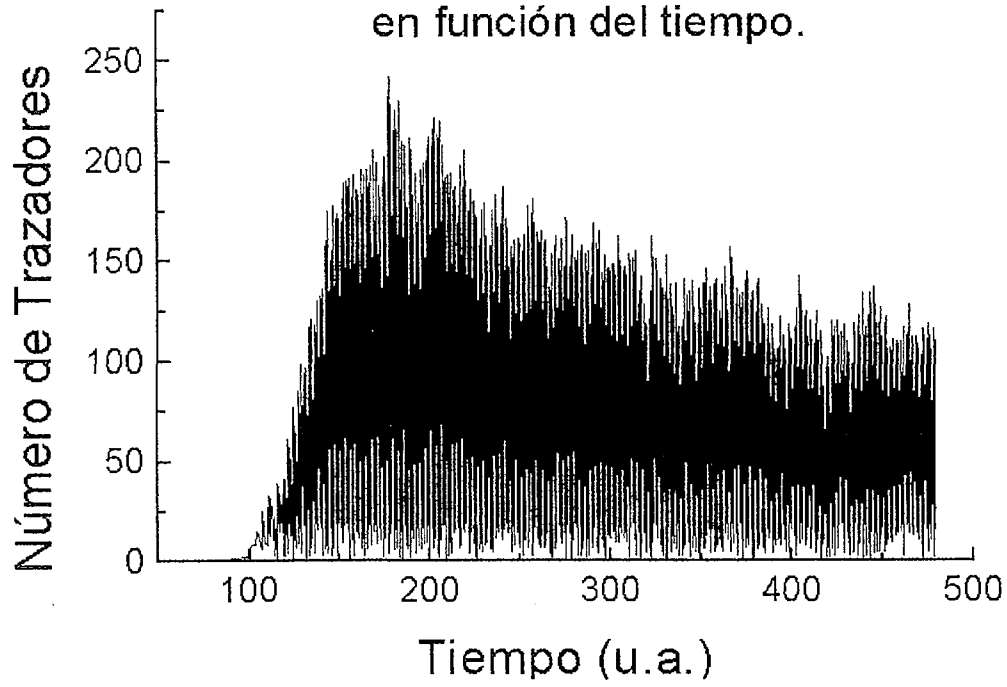
Los resultados de nuestras simulaciones son los siguientes.

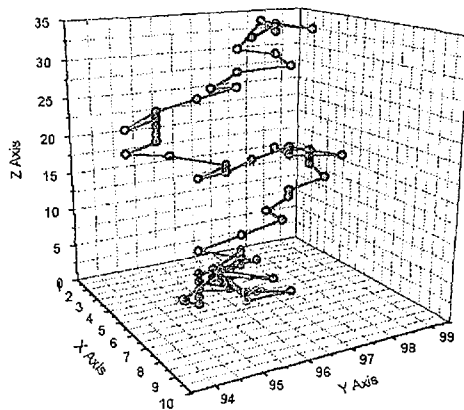
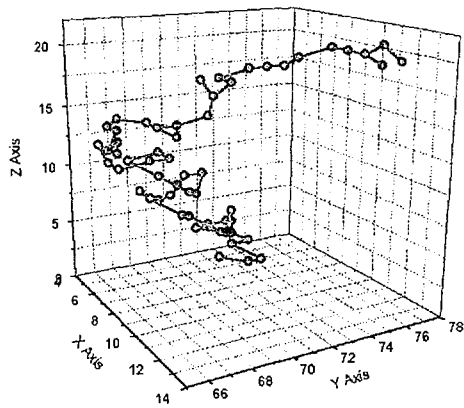
Caudal de llegada de los trazadores.



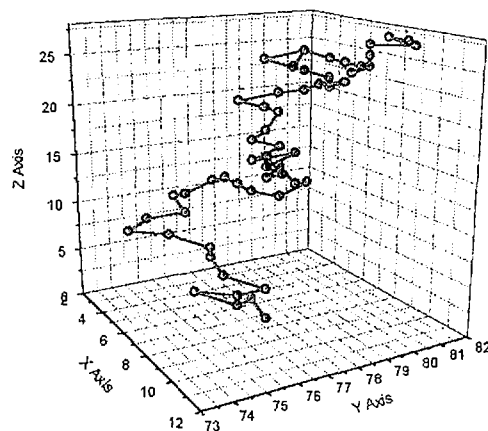


### Trazadores en sección media en función del tiempo.





En las figuras anteriores se muestran los resultados de la simulación correspondiente al proceso de transporte de trazadores conservativos en la muestra de arcilla simulada mostrada anteriormente. En dicho proceso se considera una concentración inicial  $C(x=0,t=0)$  en un plano de la muestra cúbica (3D) de la arcilla. Se supone un campo uniforme de pequeña intensidad que va del plazo  $z=0$  al plano  $z=100$ . En las gráficas se pueden observar el caudal de salida en el plano  $z=100$ , las distribuciones de



portadores a lo largo del eje central del plano  $z=0$  al  $z=100$  en diferentes instantes de tiempos, el paso de trazadores por la sección  $z=50$  a lo largo del tiempo y diferentes trayectorias de partículas en la muestra. De estos resultados se puede observar que la limitación impuesta por el campo aleatorio de velocidades y la aleatoriedad del medio, en el que todos los puntos no son accesibles para el transporte, se deja *notar* en los mismos en los que se observan las características de un transporte *anómalo*.

Dicho proceso consiste en un *random walk* en un campo aleatorio de velocidades (movilidades) que puede formularse con toda generalidad como:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -(1 - E^{-1})V_i P(i, t)$$

Donde  $V_i \gg 0$  es un campo aleatorio de velocidades positivas que vendrá definido por sus correspondientes funciones de correlación a  $n$  puntos. Consideraremos campos uniformes y sin correlacionar cuya densidad viene dada por  $P_x(V)$ .

Para estudiar el transporte de trazadores no conservativos o el transporte de sales bastará con añadir a esta ecuación bien un término de aniquilación, para el primer caso, bien un término de aniquilación y uno de recombinación, para el caso de sales.

Por último querría decir que este tipo de modelos nos va a permitir factores trascendentales para el transporte y la caracterización del medio tales como la coordinación, la tortuosidad de la bentonita y el recorrido libre medio de trazadores. Dichos resultados contrastados con los experimentales obtenidos de diferentes ensayos, nos permitirán realizar unas estimaciones realistas de estos parámetros, de los que actualmente se carece.