

Simulación de la Percolación
de Agua en un Bloque de
Bentonita Febex Utilizando
el Programa TOUGH2

A. Bru

32 / 46



ES0100241



MINISTERIO
DE CIENCIA
Y TECNOLOGÍA

Ciemat Centro de Investigaciones
Energéticas, Medioambientales
y Tecnológicas

Simulación de la Percolación
de Agua en un Bloque de
Bentonita Febex Utilizando
el Programa TOUGH2

A. Bru

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; WATER .

**Simulación de la Percolación de Agua en un Bloque de Bentonita Febex
Utilizando el Programa TOUGH2**

Bru, A.;
13 pp. 17 figs. 0 refs.

Resumen

Utilizamos el programa Tough2 para simular la percolación de agua en un bloque de bentonita Febex. De los resultados obtenidos concluimos que la aproximación de campo medio no describe el proceso por que la heterogeneidad del medio no está incluida en el formalismo matemático.

Simulation of Water Percolation in a FEBEX Bentonite Block Using TOUGH2 Program

Bru, A.;
13 pp. 17 figs. 0 refs.

Abstract

We use Tough2 program to simulate the water percolation in a Febex bentonite block. From obtained results, we conclude that mean field approximation does not describe this process because the heterogeneity of the medium it is not include in the mathematical formalism.

La simulación ha sido realizada con el programa "TOUGH2", de aplicación específica en medios porosos. Los parámetros y funciones relativos a las propiedades de la arcilla que hemos utilizado se describen a continuación.

Parámetros:

- Porosidad: 40%
- Densidad de grano: 2700 Kg/m³
- Permeabilidad absoluta: 5.0x10⁻¹⁴ m²
- Conductividad calorífica (saturación de líquido): 1.24 W/m°C
- Conductividad calorífica (material seco): 0.52 W/m°C
- Calor específico: 767 J/Kg °C
- Compresibilidad: 2.0x10⁻⁸ m²/N
- Expansividad térmica: 1.0x10⁻⁴ °C⁻¹
- Factor de tortuosidad (relativo a difusión binaria): 0.25

Funciones:

-Permeabilidad relativa en función del grado de saturación:

$$k_{rl} = S_l^3 ; \quad k_{rg} = 1 ; \quad (S_l : \text{Porcentaje de líquido en los poros})$$

-Presión de succión relativa a la saturación de líquido:

$$P_{cap} = 0 ; \quad (S_l > S_{ls})$$

$$P_{cap} = -P_0 [(S^*)^{-1/\lambda} - 1]^{1-\lambda}$$

$$P_{cap} = -P_{max} ; \quad (P_0 [(S^*)^{-1/\lambda} - 1]^{1-\lambda} \geq P_{max})$$

Parámetros de esta función:

$$P_0 = 14.3 \text{ MPa} ;$$

$$\lambda = 0.45 ;$$

$$S^* = (S_l - S_{lr}) / (S_{ls} - S_{lr}) ; \quad S_{lr} = 0.08 \text{ (saturación remanente)}$$

$$S_{ls} = 1.0 \text{ (saturación máxima permitida)}$$

$$P_{max} = 4.0 \times 10^8 \text{ Pa}$$

Condiciones iniciales:

$$S_l = 60\%$$

$$P = 1.0 \times 10^5 \text{ Pa}$$

$$T = 25 \text{ °C}$$

Condiciones geométricas y de contorno:

El bloque de arcilla tiene un tamaño de 12x12x2 cm, y está colocado en posición vertical, rodeado de paredes impermeables excepto por la parte inferior, donde está en contacto con una capa de agua de la que succiona nuestro material, y por la parte superior, en la cual hemos supuesto un material permeable al aire pero no al agua, para que no exista una presión adicional que frene el avance del líquido.

El proceso no implica transferencia de calor, pero hemos incluido las propiedades térmicas del material para una mayor aproximación a la realidad.

El agua introducida está a la misma temperatura que el bloque y sus características están tomadas en condiciones estándar.

Casuística:

Se ha realizado la simulación variando diferentes condiciones:

- El tamaño de las celdas: Los resultados no varían cualitativamente.
- La presión P_0 en la función de capilaridad:
 - La variación es la esperada, aumentando el tiempo de hidratación aunque no significativamente.
- La forma de introducir agua en el material:
 - Mediante inyectores de agua implementados con el bloque "GENER", situados en una de las caras del material.
 - Mediante una capa de agua en contacto con una de las caras del bloque, de la cual absorbe el líquido en la proporción que necesita.
- El incremento temporal en cada iteración:
 - No cambia las condiciones del sistema, simplemente permite representar con mayor fiabilidad los datos.

Definimos dos parámetros a tener importantes en nuestra simulación, que serán los que vamos a tener en cuenta a la hora de interpretar los resultados:

- Frente de saturación: Lugar geométrico de los puntos que separan las zonas del material con porcentaje de agua mayor y menor del 95%.
- Frente de hidratación: Lugar geométrico de los puntos que separan las zonas del material con porcentaje de agua mayor y menor del 65% (teniendo en cuenta que en seco hay un 60% de agua en los poros).

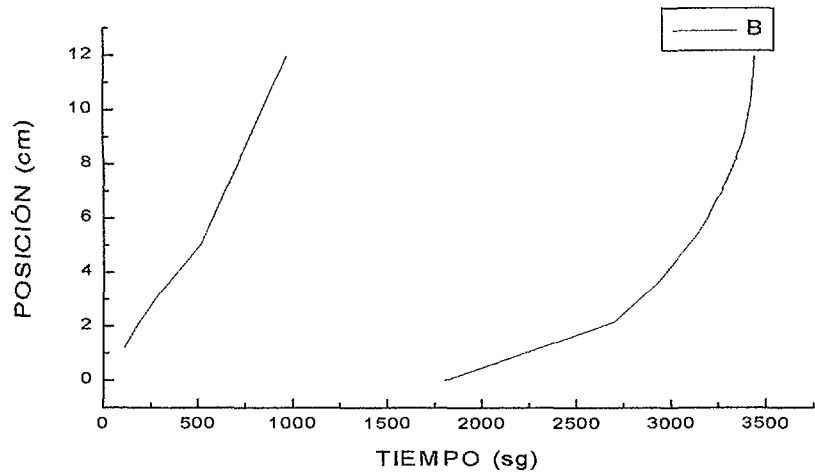
Asimismo, tendremos en cuenta la masa total de agua absorbida por el bloque.

Resultados:

En todos los casos, el agua se introduce en el bloque a través del plano $z=0$, y la concentración de agua se mantiene siempre constante en planos paralelos a éste, por lo que a la hora de representar los frentes y las concentraciones, lo haremos tomando una las columnas de celdas en dirección vertical, que es la única relevante en esta simulación.

1. Introducción del agua por inyección: 36 g/h en cada elemento.
Red de 12 x 1 x 50 celdas (mayor número en la dirección de avance del agua).

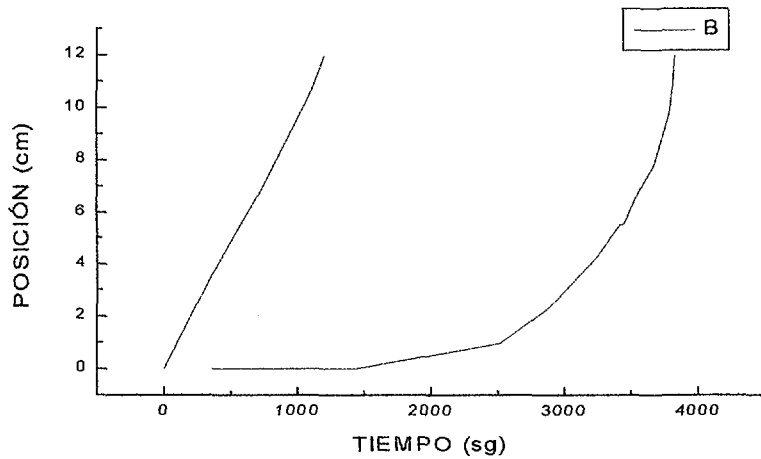
Al representar los frentes de hidratación y saturación, vemos que el primero tiene un comportamiento aproximadamente lineal, y alcanza el final del bloque muy rápidamente, mientras que el segundo comienza a avanzar cuando el otro ha llegado ya al final, y lo hace de forma exponencial.

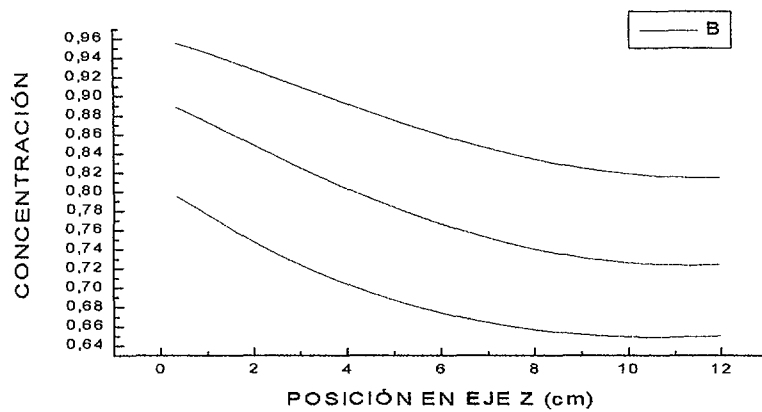


El agua succionada en cada iteración se extiende prácticamente por todo el material antes de que se saturen los elementos que están en contacto con los inyectores.

Representando el volumen total de agua en el bloque frente al tiempo nos daría una recta, lo cual es lógico, si vemos que la tasa de líquido que estamos metiendo es constante. Por tanto, el bloque absorbe toda el agua que nosotros le proporcionamos.

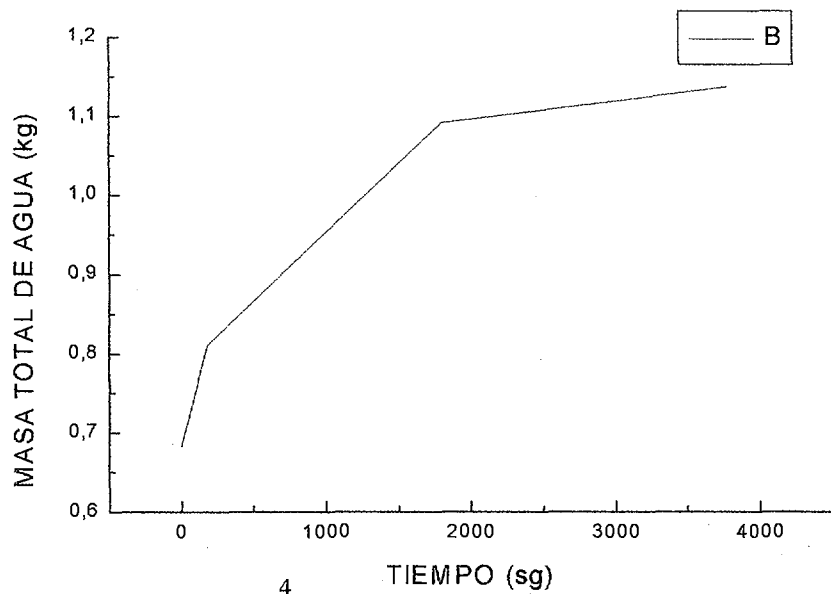
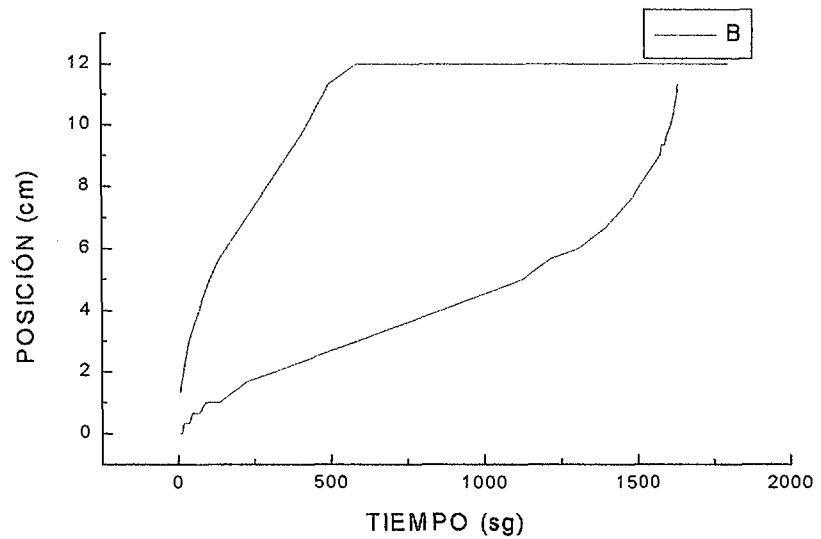
2. Igual forma de inyectar el líquido.
Red de 12 x 1 x 37 celdas.





En la última gráfica vemos que lo dicho anteriormente sobre la forma de extenderse el agua por el material es correcto.

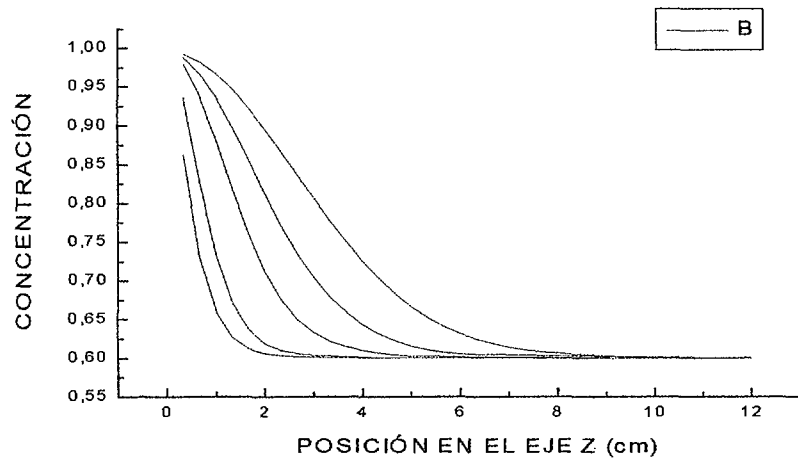
3. Absorción libre de agua, sin inyectores.
Red de 12 x 1 x 36 celdas.



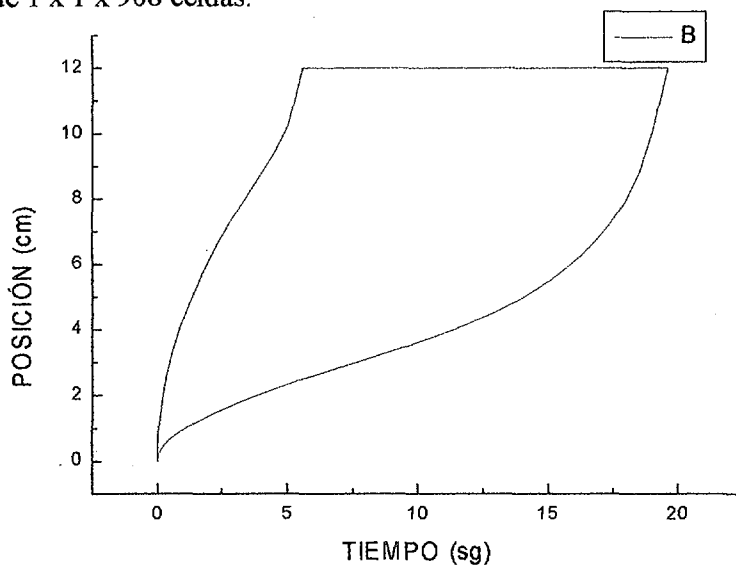
El comportamiento de la arcilla es totalmente distinto ahora, y podemos suponer que es su comportamiento "natural", ya que puede absorber la cantidad de agua que su presión permita, sin estar sometida a fuente externa alguna.

Hay que señalar que en los valores que aparecen en la gráfica, también se cuenta la capa de agua que hemos situado sobre nuestro bloque, por eso puede parecer que es demasiada cantidad y que no cabría en nuestro trozo de material. Esto sólo supone una traslación en el eje de masas, sin cambio de la curva.

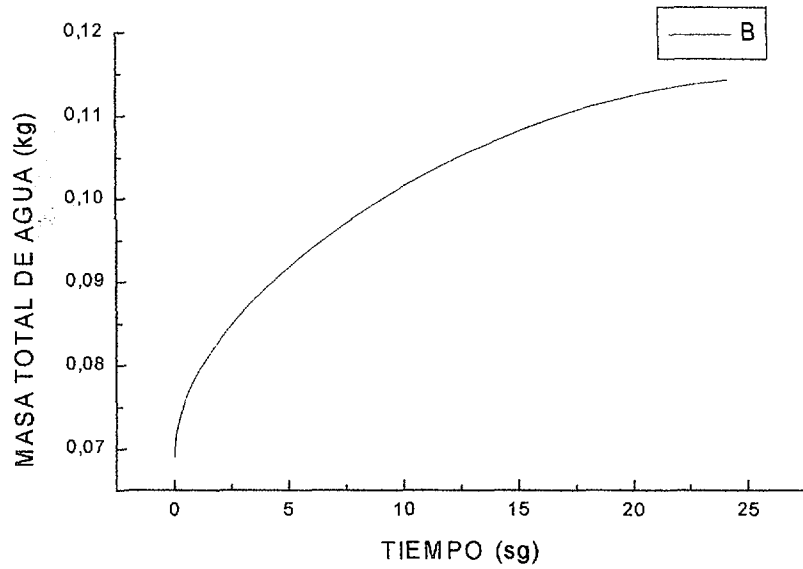
Las curvas de concentración también son diferentes que en cuando teníamos inyectores, y los frentes de hidratación y saturación llegan a coexistir en el tiempo.



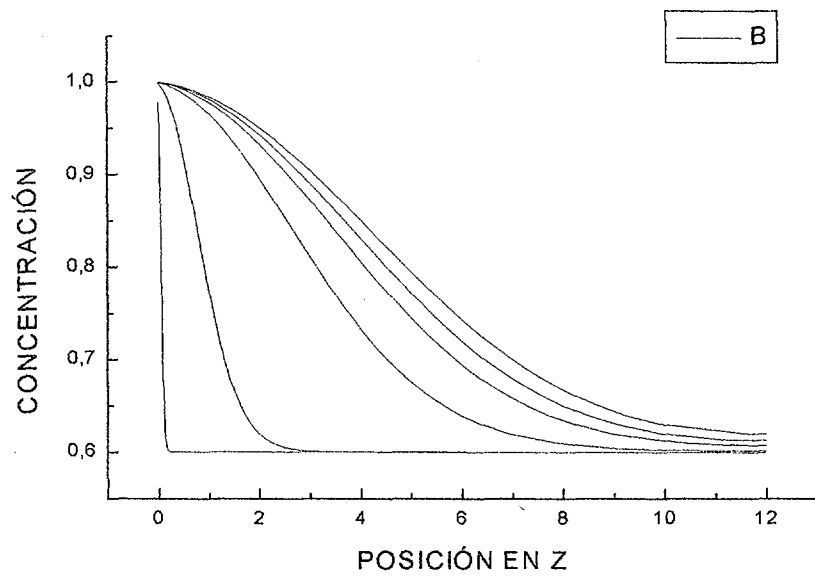
4. Igual absorción de agua.
Red de 1 x 1 x 908 celdas.



Dada la gran definición tomada en el eje z, apreciamos mejor el comportamiento de los frentes, especialmente el de saturación.



También ocurre lo mismo al observar la masa total de agua, y las curvas de concentración:



Se observa que la forma de hidratarse es mucho menos uniforme que cuando teníamos inyectores.

Conclusiones:

Los resultados de la simulación no se corresponden con los experimentales por varios motivos:

- El tiempo de hidratación es mucho menor en la simulación, en órdenes de magnitud, por lo que no se puede achacar a una presión incorrecta, sino a un proceso cualitativamente diferente.
- Esta idea se refuerza al comprobar que en la simulación, no se frena en ningún momento el avance del líquido, mientras que esto sí ocurre en la realidad.
- La distancia entre frentes es mucho mayor en la simulación, posiblemente en relación con la rápida dispersión del agua a través del medio.

Podemos concluir a partir de esto, que el programa no tiene en cuenta los efectos propios de los medios desordenados, que producen “pinning”, es decir, frenado en el avance de líquido, así como inhomogeneidad en la forma del frente en planos paralelos al de introducción de agua.

Tampoco considera que se produce una presión de hinchamiento en el material al absorber el líquido, que ayuda a dificultar su paso.

Aparentemente, el programa trata al medio como un simple conjunto de poros a través de los cuales va percolando el agua, con el único inconveniente de desalojar el gas que en principio llena los mismos.

Hemos tenido problemas de convergencia numérica en diversas ejecuciones, ya que está limitado –aunque se puede cambiar– el número de elementos en los vectores de datos y de ecuaciones que el programa utiliza. En estos casos, los resultados daban, unas veces, saturación instantánea, y otras ausencia de penetración de líquido.