

SIMULACIÓN MATEMÁTICA DE LA LEY DE DARCY EN CELDA DE ELECTROREMEDIACION DE SUELOS

García Hernández Laura¹, Vargas Ramírez Marissa.¹, Cruz R. Alejandro²

¹Centro de Investigaciones en Materiales y Metalurgia, UAEH. Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5, C.P 42184, Pachuca Hgo., México.

²Departamento de Ingeniería Metalúrgica. ESIQIE-IPN, Av. Instituto Politecnico Nacional, C.P 07738, México D.F, México.

RESUMEN

La industria minera en México ha generado por décadas una gran cantidad de desechos y sitios contaminados a lo largo de todo el país, para el tratamiento de estos sitios contaminados en las últimas décadas se han propuesto diversas tecnologías. La electroremediación, es una tecnología en desarrollo que aprovecha las propiedades conductivas del suelo, cuyo objetivo es separar y extraer contaminantes orgánicos e inorgánicos (metales). Este trabajo pretende realizar un estudio que permita ayudar a la remediación de sitios contaminados con metales pesados, para lo cual se desarrolló el modelado matemático de la ley de Darcy en combinación con la ecuación de continuidad mediante el uso de ecuaciones diferenciales parciales con ayuda del software comercial COMSOL 3.2, para la determinación de perfiles de velocidades de flujo en suelos. Se considero en la modelación una celda de 0.045 m de diámetro y 0.1 m de longitud, los suelos se consideraron permeables e impermeables, con presiones del fluido a la entrada de 1.013×10^5 , 1.519×10^5 y 2.026×10^5 Pa, y una presión de salida de 1.013×10^5 . Los resultados obtenidos por el software muestran que las velocidades se comportan de manera constante a lo largo de la celda electroquímica, para medios permeables la velocidad es 100 veces mayor que para medios impermeables. La presión disminuye gradualmente a lo largo de la celda dependiendo de la presión de entrada y de salida considerada.

ABSTRACT

The mexican mine industry has produced ore wasted and contaminated places all over the country for decade. In the last years several technologies has been proposed for the treatment of these contaminated places. The electro remediation is a recent technology that consider the soil conductive properties in order to separate and extract the harmful agents (metals mainly) from the soil. This work was developed to give insight in the soil remediation of contaminated places with heavy metals, for this reason a mathematical model was developed to solve the Darcy law in combination with the continuity equation with the commercial software COMSOL 3.2, to obtain the velocity flux in the soil. The model considered a cell of 0.045 m in diameter and 0.1 m in lenght, permeable and not-permeable soil, fluid pressure at the inner of the cell of 1.013×10^5 , 1.519×10^5 and 2.026×10^5 Pa, with a outer pressure of 1.013×10^5 . The model results shows that the velocity flux is constant along the electrochemical cell, to permeable soil the velocity flux

is increased 100 times than impermeable soil. The pressure decrease gradually along the cell according with inner and outer pressure considered.

INTRODUCCIÓN

Los modelos matemáticos son abstracciones que representan los procesos en forma de ecuaciones; las propiedades físicas se representan como constantes o coeficientes de las ecuaciones y las medidas del estado o el potencial del sistema se hace como variables. Muchos de los modelos de agua subterránea que se utilizan en la actualidad son modelos matemáticos determinísticos, que se basan en la conservación de masa, momento y energía ^[1].

El proceso del flujo subterráneo está regido por las relaciones expresadas mediante la ley de Darcy. El objetivo de un modelo que simula el transporte de solutos en el agua subterránea es calcular la concentración de las especies químicas disueltas en un acuífero en cada instante de tiempo y en cada punto. El desarrollo de las ecuaciones matemáticas que describen los procesos de flujo y transporte subterráneo se puede determinar a partir del principio fundamental de la conservación de la masa de un fluido o de un soluto. A partir de un determinado volumen representativo del medio poroso, la ecuación general de la conservación de la masa para ese volumen se expresa como: ^[2], ^[3]

$$(\text{caudal de masa que entra}) - (\text{caudal de masa que sale}) + (\text{caudal de producción de masa/consumo de masa}) = (\text{caudal de masa acumulada})$$

Esta ecuación de la conservación de la masa puede combinarse con una expresión matemática del proceso relevante para obtener una ecuación diferencial que describa el flujo y el transporte ^[4] ^[5] ^[6].

Cuando el agua penetra a un suelo y se mueve dentro de él, lo hace a través de los poros, que varían en forma, diámetro y dirección. Debido a estas condiciones, la velocidad con que se mueve el agua en el suelo es muy variable. El movimiento es más rápido a través de los poros grandes que en los pequeños; aun en un mismo poro, el agua se mueve con mayor rapidez por el centro del poro que cerca de las paredes de éste ^[7].

La permeabilidad del suelo (K), depende de su porosidad, de la distribución, tamaño, geometría y distribución de los poros. La fluidez del agua depende de la presión a la que este sometida y de su temperatura, la cual afecta directamente a su viscosidad y densidad.

En suelos permeables todos los poros contribuyen a conducir agua y debido a la abundancia de poros de radio grande, la fricción de las moléculas de agua es pequeña, por lo tanto K es grande. En el caso de suelos impermeables, K es menor debido a que la gran mayoría de sus poros son pequeños, tabla I.

La ley de Darcy sólo trabaja bajo flujo laminar, donde las fuerzas de inercia son despreciables respecto de las fuerzas viscosas y donde las interacciones suelo - agua no producen modificaciones significativas en la fluidez o en la permeabilidad al cambiar el gradiente hidráulico.

Con la combinación de la ley de Darcy y la ecuación de la conservación de la masa se puede obtener una ecuación de forma general que describa el flujo transitorio de un fluido compresible en un suelo contaminado, así como la concentración de especies contaminantes, en el proceso de electroremediación.

Tabla I. Permeabilidades relativas

Permeabilidad relativa	Permeable	Semi-Permeable		Impermeable	
Arena o grava consolidada	Grava continua (o redondeada)	Arena continua o mixta	Arena fina		
Arcilla no consolidada y materia orgánica		Turba	Estrato arcilloso	Arcilla expansiva	
Roca consolidada	Rocas muy fracturadas	Roca petrolífera	Piedra arenisca	Roca sedimentaria, Dolomita	Granito
K (m ²)	10 ⁻⁷ a 10 ⁻¹⁰	10 ⁻¹¹ a 10 ⁻¹⁴		10 ⁻¹⁵ a 10 ⁻¹⁹	

DEFINICION DEL MODELO MATEMATICO

COMSOL 3.2 es una herramienta de modelado y análisis para prototipos virtuales de fenómenos físicos, puede modelar virtualmente cualquier fenómeno físico que se pueda describir con ecuaciones diferenciales parciales (PDEs), soportando la integración de problemas de diferentes campos (Multifísica).

La ley de Darcy es el pilar fundamental de la hidrología subterránea, en el software se consideró el cálculo de las velocidades de Darcy junto con la ecuación de la conservación de la masa para simular el movimiento del fluido en un medio poroso homogéneo.

En la ley de Darcy el vector velocidad es determinado por el gradiente de presión, la viscosidad del fluido y la estructura media de los poros, mediante la siguiente ecuación:

$$u = -\frac{k}{\eta} \nabla p \quad (1)$$

Donde:

k Permeabilidad del medio poroso (L^2)

η Viscosidad del fluido (M/LT)

∇p Presión (M/LT²)

u Vector velocidad (L/T)

En el software comercial COMSOL 3.2, se utilizó la aplicación del modulo de ingeniería química, en donde se considera la combinación de la ley de Darcy con la ecuación de la conservación de la masa, de acuerdo a la siguiente ecuación.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla \cdot \rho u = 0 \quad (2)$$

sustituyendo esta última expresión en la ecuación (1) obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \nabla \cdot \rho \left(-\frac{k}{\eta} \nabla p \right) = 0 \quad (3)$$

Donde:

ρ Densidad del fluido (M/L³)

ε Fracción de volumen

La ley de Darcy se puede combinar con las siguientes condiciones límite:

1. Límite a una determinada presión: $P = P_0$
2. Límite impermeable o simétrico: $-\frac{k}{\eta} \nabla p \cdot n = 0$
3. Límite flujo perpendicular: $-\frac{k}{\eta} \nabla p \cdot n = u_o$

La geometría de la celda, es cilíndrica, con 0.045 m de diámetro y 0.1 m de longitud para el volumen de suelo, la modelación en el software se hizo en 2D. Se establecen las condiciones de frontera y condiciones iniciales (tiempo=0) para la integración en espacio y en tiempo; se considera que la entrada se ubica en la posición $X=0$, mientras que en la salida se encuentra en la posición $X=L$, figura 1.

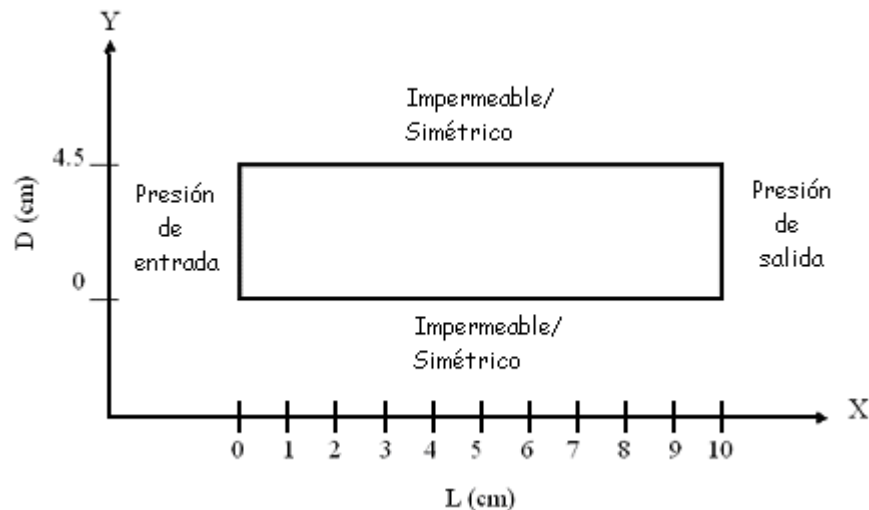


Figura 1. Geometría en 2D de la celda cilíndrica, con condiciones límite

Se consideró agua como fluido, con una viscosidad de 8.91×10^{-4} Kg/m s a 298 K, con presiones de entrada al volumen de suelo de 1.01×10^5 , 1.56×10^5 y 2.02×10^5 Pa y una presión de salida de 1.01×10^5 Pa, considerando que el sistema tiene un comportamiento laminar.

Se consideraron dos suelos, uno permeable ($k= 1 \times 10^{-10}$ m²), y otro impermeable ($k= 1 \times 10^{-15}$ m²).

Se trabajó a un tiempo de 36000 segundos a intervalos de 60 segundos considerando un factor de escala de 1 y 920 nodos de mallado.

RESULTADOS

En la figura 2 y 3 se muestran los resultados de la modelación en el comportamiento del perfil de velocidades del fluido en suelo permeable ($K=1 \times 10^{-10}$) e impermeable ($K=1 \times 10^{-13}$), respectivamente, a diferentes valores de presión de entrada A) 1.013×10^5 , B) 1.519×10^5 , C) 2.026×10^5 Pa. Se observa que la velocidad aumenta al incrementar la presión de entrada y la velocidad obtenida es mayor en los suelos permeables que en los impermeables.

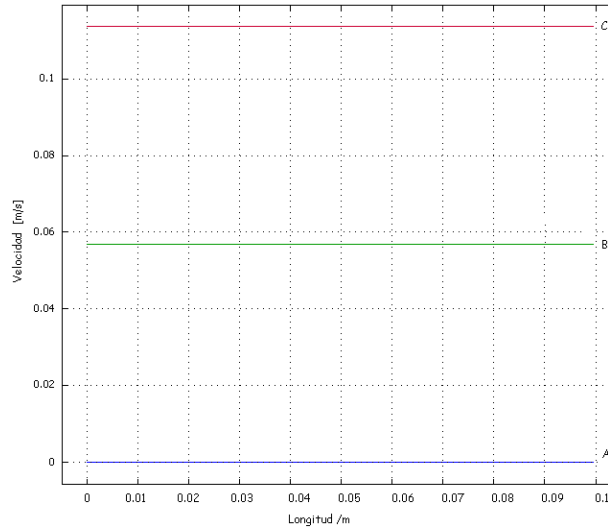


Figura 2. Perfil de velocidades del flujo de agua en un suelo permeable ($k= 1 \times 10^{-10} \text{ m}^2$) a las presiones de entrada de A) 1.013×10^5 , B) 1.519×10^5 , C) 2.026×10^5 Pa.

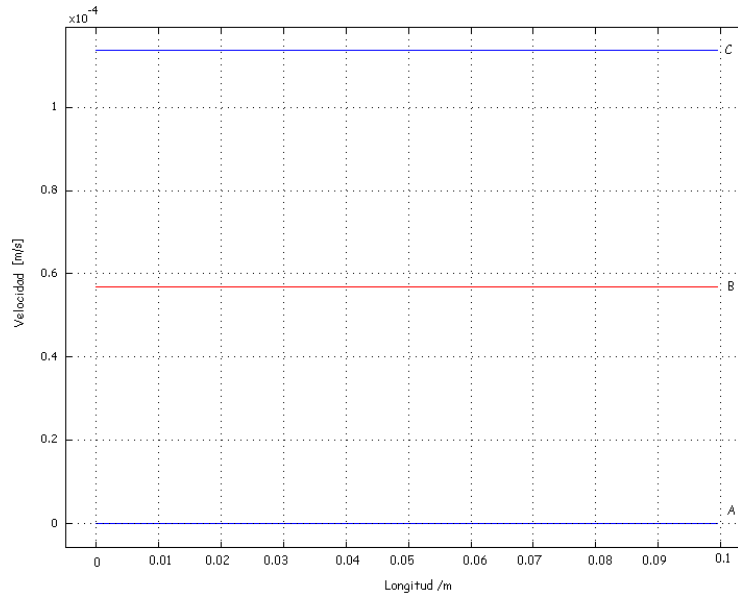


Figura 3. Perfil de velocidades del flujo de agua en un suelo impermeable ($k=1 \times 10^{-13} \text{ m}^2$) a las presiones de entrada de A) 1.013×10^5 , B) 1.519×10^5 , C) 2.026×10^5 Pa.

En la figura 4 se compara el comportamiento de la velocidad para los dos tipos de suelos considerados, estos son, el suelos permeable con $K=1 \times 10^{-10}$ y el suelo impermeable con $K=1 \times 10^{-13}$, la presión de entrada considerada es de 1.519×10^5 Pa. De esta figura se observa que la velocidad del fluido disminuye cuando disminuye el valor de la permeabilidad (K), este comportamiento es lógico, debido a que el movimiento del fluido, en este caso agua, es más rápido a través de los poros grandes de los suelos permeables, que los poros pequeños que se encuentran en los sistemas impermeables.

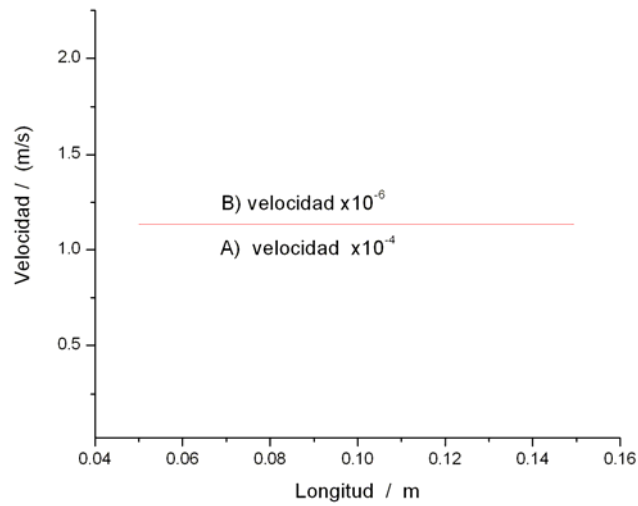


Figura 4. Perfil de velocidad del flujo en la celda electroquímica a diferentes permeabilidades A) 1×10^{-10} , B) $1 \times 10^{-15} \text{ m}^2$.

En la figura 5 se evaluó el comportamiento de la presión considerando la longitud total de la celda con una permeabilidad relativa de 1×10^{-10} , la cual corresponde a un suelo permeable. Las presiones de entrada fueron de A) 1.013×10^5 , B) 1.519×10^5 y C) 2.026×10^5 Pa y la presión de salida se fijó en 1.013×10^5 Pa. De esta gráfica se observa que la presión disminuye gradualmente de forma lineal a lo largo de la celda debido al gradiente de presión considerado, siendo independiente de la permeabilidad.

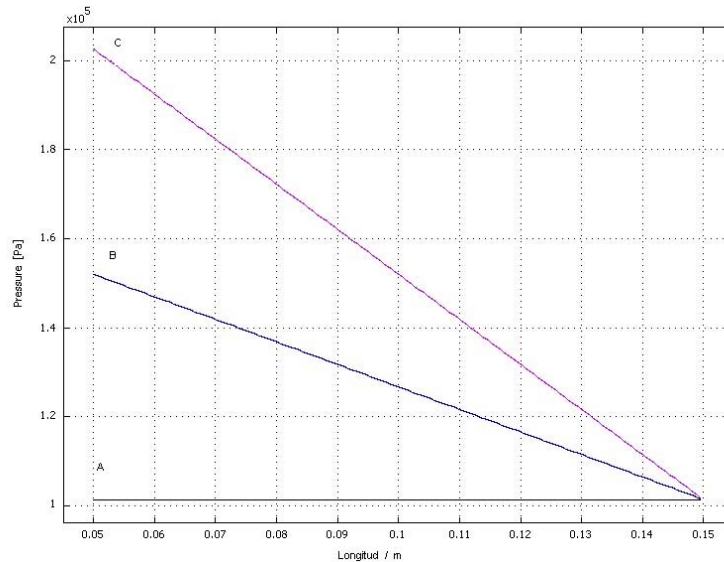


Figura 5. Variación de la presión a lo largo de la celda electroquímica, con presiones de entrada de A) 1.013×10^5 , B) 1.519×10^5 , C) 2.026×10^5 Pa.

Los resultados de la modelación indican que la remediación de suelos de metales pesados es posible desde el punto de vista matemático, considerando un suelo permeable ya que el comportamiento de la velocidad del fluido que se obtiene es laminar con el gradiente de presión considerado en el intervalo de 1.013×10^5 a 2.026×10^5 Pa, con lo cual se concluye que la ley de Darcy es aplicable a este sistema con las parámetros experimentales establecidos.

CONCLUSIONES

En la simulación se utilizó la ley de Darcy para obtener las velocidades del fluido mediante un gradiente de presión en un medio poroso, considerando suelos permeables e impermeables como sistema estacionario, y agua como fluido. En base a lo anterior se concluye lo siguiente:

- La velocidad del fluido aumenta al incrementar la presión de entrada en la celda. Este comportamiento se obtuvo para ambos tipos de suelos.
- La velocidad del fluido en un medio poroso varía de forma directamente proporcional a la permeabilidad del suelo. Para sistemas permeables la velocidad es 100 veces mayor que para sistemas impermeables.
- El gradiente de presión dentro de la celda varía linealmente de forma gradual, dependiendo de las presiones de entrada y salida

BIBLIOGRAFÍA

1. Konikow L.F. United States Geological Survey, Reston, Virginia, USA, Isótopos Ambientales en el Ciclo Hidrológico IGME. Temas: Guías y manuales. ISBN: 84-7840-465-1.
2. Konikow L.F., 1996. Numerical models of groundwater flow y transport. In: Manual on Mathematical Models in Isotope Hydrogeology, International Atomic Energy Agency Rept. IAEA-TECDOC-910, Vienna, Austria: 59-112.
3. Konikow L.F., Reilly, T.E., 1998. Groundwater Modelling. In: The Handbook of Groundwater Engineering [J.W. Delleur, ed.], CRC Press, Boca Raton 20:1-20, 40.
4. Bear J., Verruyt, A., 1987. Modelling Groundwater Flow y Pollution. Reidel Publishing Co., Dordrecht, Holland: 414 pp.
5. Domenico P.A., Schwartz, F.W., 1998. Physical y Chemical Hydrogeology. John Wiley & Sons, New York [2nd Ed.]: 506 pp.
6. Freeze R.A., Cherry, J.A., 1979. Groundwater. Prentice- Hall, Englewood Cliffs: 604 pp.
7. Eduardo Narro Farías, Física de Suelos con Enfoque Agrícola, Editorial Trillas, 1994