

**SOCIEDAD CHILENA DE INGENIERÍA HIDRÁULICA
XXII CONGRESO CHILENO DE INGENIERÍA HIDRÁULICA**

**SIMULACIONES DEL FLUJO EN MEDIOS PERMEABLES SATURADOS A LA
ESCALA DE POROS**

**GERARDO ZEGERS R.¹
PAULO HERRERA R.²**

RESUMEN

En los últimos años, ha habido varios avances en las técnicas computacionales que han permitido investigar diferentes procesos físicos en medios porosos a la escala de poros a través de simulaciones numéricas. Estas simulaciones consideran medios porosos sintéticos formados por granos regulares y dispuestos en diferentes configuraciones geométricas. A partir de las distintas configuraciones y a través de simulaciones numéricas es posible imitar los patrones de flujo que existen en medios permeables reales y simular procesos de transporte que ocurren a la escala de poros. A pesar de avances recientes en este tipo de estudios, existen pocos resultados que permitan determinar la influencia de las configuraciones geométricas sobre los procesos de flujo y transporte. El objetivo principal de esta investigación es estudiar la influencia de las configuraciones geométricas en los campos de velocidad simulados para medios porosos saturados bidimensionales (2D). Para generar los campos de velocidades a partir de simulaciones numéricas utilizamos OpenFOAM. Usando OpenFOAM es posible simular simultáneamente diversos procesos físicos, por ejemplo, el flujo y ecuaciones de transporte en geometrías complejas como las que resultan de las distintas configuraciones de poros analizadas. Generamos los medios permeables sintéticos en 2D a partir de granos sólidos circulares ubicados de manera ordenada y aleatoria según sea el caso. Para cada configuración geométrica simulamos el campo de flujo y calculamos propiedades efectivas, tales como la tortuosidad, velocidad media y conductividad hidráulica. El análisis de los resultados de las simulaciones muestra que en todas las configuraciones simuladas las propiedades de flujo efectivas se hacen válidas a partir de 10 a 15 granos. Para una misma porosidad y condiciones de borde, la tortuosidad en la geometría aleatoria es mayor que en las configuraciones ordenadas, mientras que la conductividad hidráulica es menor. Estos resultados indican que la distribución de los poros puede tener una gran influencia en los parámetros efectivos que se utilizan para describir medios permeables como medios continuos, por lo tanto la generalización de los resultados obtenidos a partir de las distintas geometrías de granos puede ser difícil o imposible.

¹ Estudiante Magister RHMA, Depto. de Ingeniería Civil, Universidad de Chile – gzegers@ing.uchile.cl

² Profesor Asistente, Depto. de Ingeniería Civil, Universidad de Chile - pherrera@ing.uchile.cl

INTRODUCCIÓN

La estructura de un medio poroso y las características físicas de los sólidos y líquidos que ocupan los espacios de poros determinan las propiedades macroscópicas de los procesos de flujo y transporte que ocurren en el medio. Por lo tanto, entender la relación entre la estructura y las propiedades macroscópicas del suelo es de gran importancia teórica y práctica (Oren and Bakke 2003). El análisis realizado en este trabajo consiste en la primera parte de un trabajo más amplio que busca caracterizar el efecto que tiene la geometría del medio poroso en el transporte de calor.

Generalmente al realizar simulaciones a escala de poros en 2D existen dos enfoques, crear una red de flujo compuesta por nodos y arcos (por ejemplo, Bons et al., 2013; Blunt, 2001) o, como se utilizará en este trabajo, modelando los granos con geometrías sintéticas, ya sea con arreglos ordenados (Zhu and Fox, 2002) o con arreglos aleatorios (De Anna et al., 2013).

En este trabajo se estudia el flujo a escala de poros en distintas geometrías generadas sintéticamente para estudiar y comprender el efecto de la estructura geométrica de los poros en las propiedades macroscópicas de flujo y transporte. Se generaron cinco tipos de geometrías ordenadas y cinco geometrías aleatorias con círculos entre 0.3 y 0.7 mm. En todas las geometrías se consideró una porosidad de 40%. La Figura 1 muestra las geometrías generadas, donde la geometría A es una de las geometrías aleatorias generadas y las geometrías B-F son simétricas y ordenadas.

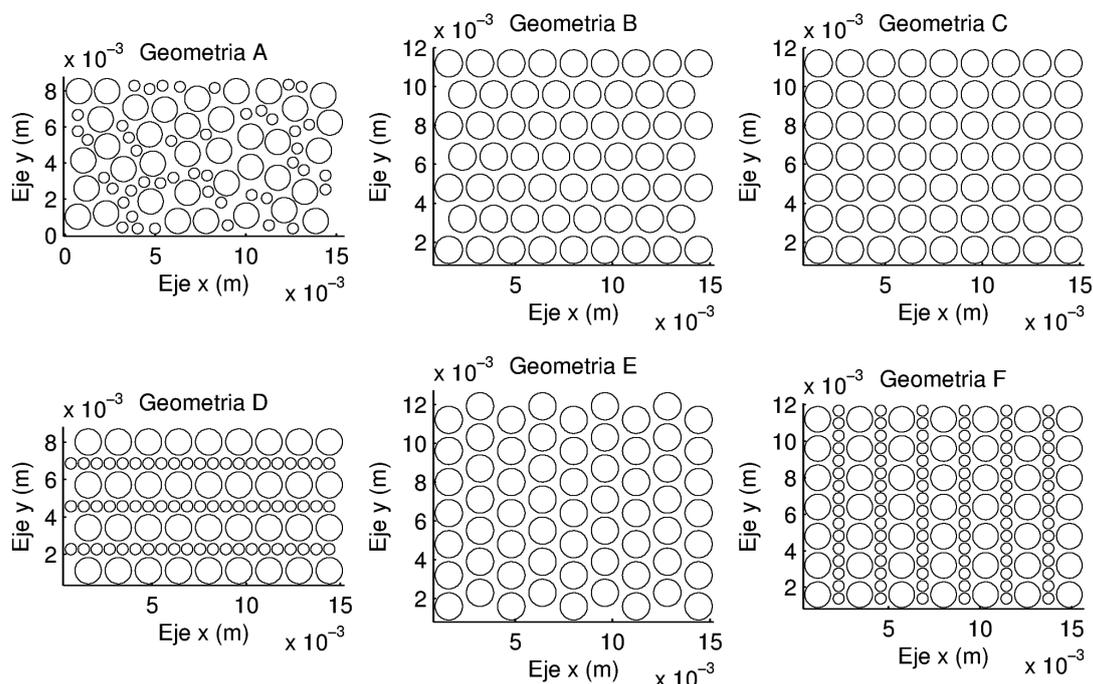


Figura 1. Configuraciones de poros analizadas. Líneas negras indican los contornos de los granos de suelos.

Para las geometrías aleatorias se consideró un dominio de 60x7 granos y en el caso de las simétricas 30x7. Se consideró una mayor longitud en el caso aleatorio debido a que el cálculo de propiedades efectivas requiere un mayor volumen en este tipo de medio.

Para cada una de las geometrías se resolvió numéricamente la ecuación de Navier-Stokes considerando solamente la zona del dominio donde hay agua, que es equivalente al espacio de poros en medios saturados. Para resolver la ecuación de Navier-Stokes a escala de poros se usó OpenFOAM, que es un software libre que trabaja con volúmenes finitos y permite resolver de forma simultánea ecuaciones que describen distintos procesos, tales como: flujo, transporte de calor y solutos, etc.

Para las simulaciones numéricas en cada una de las geometrías se usaron aproximadamente 130.000 elementos. La Figura 2 muestra la malla utilizada y las líneas de corriente en un sector de una de las geometrías aleatorias simuladas.

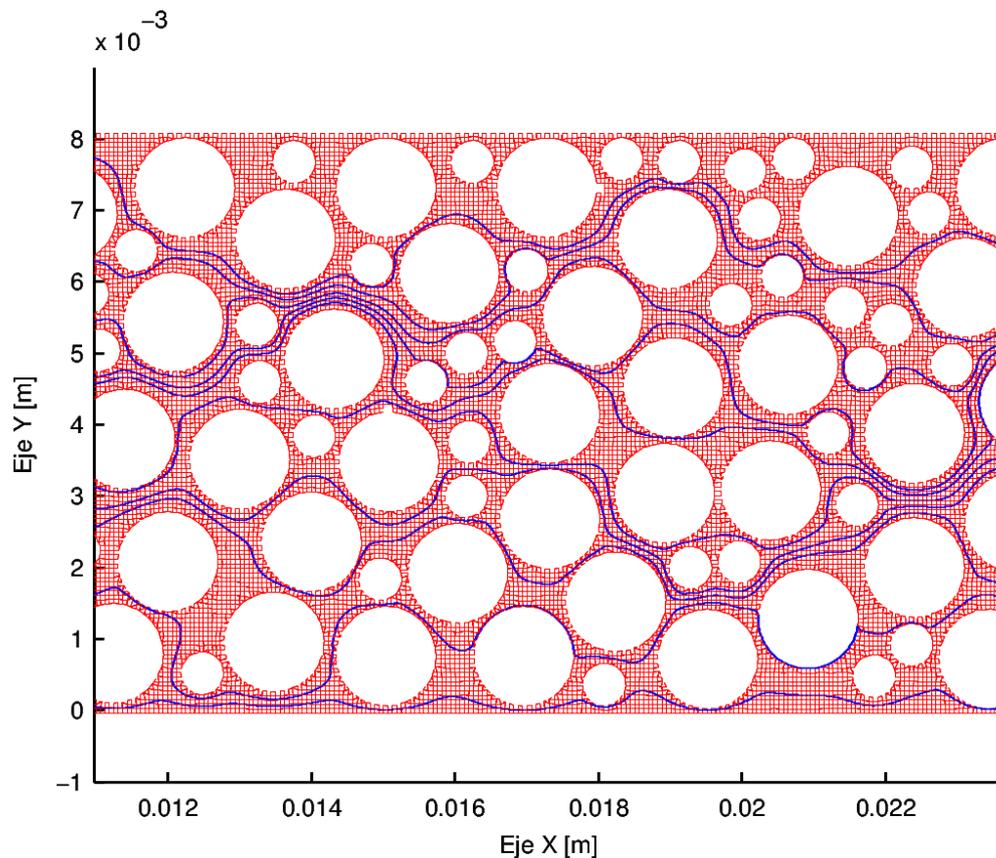


Figura 2. Líneas de corriente y malla utilizada. Las líneas azules corresponden a las líneas de corriente y las líneas rojas a la malla.

Para todas las simulaciones se impuso condición de borde de no resbalamiento alrededor de los círculos que representan los granos del medio y para el borde superior e inferior. De tal forma de generar un flujo laminar de izquierda a derecha, en el borde izquierdo se impuso una condición de borde de Dirichlet para la velocidad y presión, en cambio en el borde derecho se impuso una condición de borde de Neumann para la velocidad y presión. En la Figura 3 se pueden ver los campos de velocidad obtenidos.

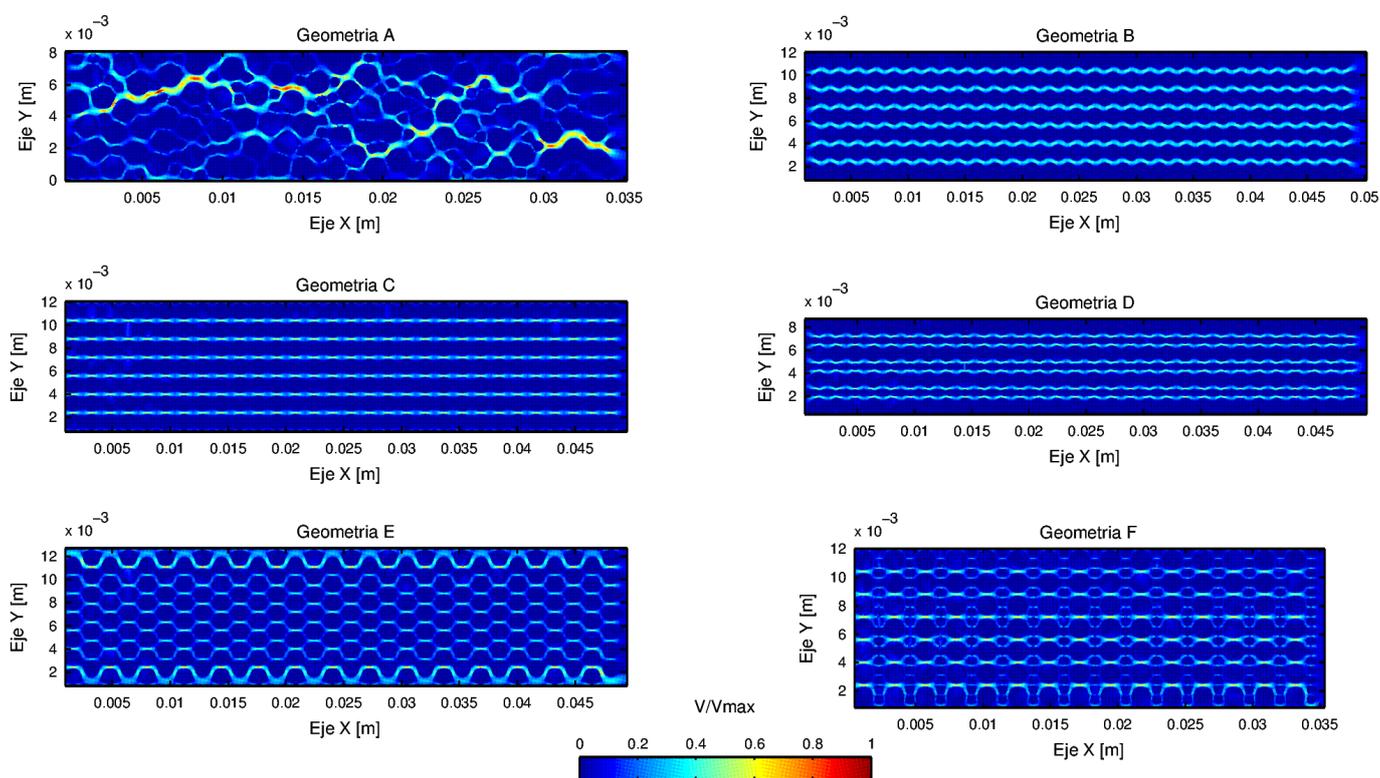


Figura 3. Campos de velocidad normalizado con respecto a la velocidad máxima. Para el caso aleatorio se muestra solamente la mitad del dominio de una de las geometrías simuladas.

En la siguiente sección caracterizamos los distintos campos de velocidad simulados, utilizando enfoques Euleriano y Lagrangiano.

ENFOQUE EULERIANO

En este enfoque analizamos la distribución de velocidad, la conductividad hidráulica y la tortuosidad.

Distribución de velocidad

La Figura 4 muestra la distribución de velocidad obtenida para cada caso. En el caso de la geometría aleatoria el gráfico corresponde al promedio entre todas las geometrías. Los campos de velocidad calculados a partir de la geometría aleatoria tienen una distribución de velocidad que es log-normal. Además se puede ver que este tipo de geometría tiene un mayor rango de velocidades y se caracteriza por tener zonas de velocidades bajas (zonas de estancamiento) y canales preferenciales de flujos, en los que se alcanzan velocidades altas. En el caso de la geometría B la distribución de velocidad es bimodal, esto se debe a que el campo de velocidad (Figura 3) está caracterizado por 2 velocidades principalmente, la velocidad que se da entre los granos (canal de flujo) y la velocidad que se obtiene al salir del canal de flujo y entrar al siguiente canal. Este efecto se aprecia también en las geometrías C y D, pero de menor manera.

En el caso de las geometrías E y F se observa comportamiento distinto a las otras geometrías simétricas, provocado por que estas geometrías son traslapadas en la dirección vertical. Estas dos geometrías muestran una distribución de velocidad más parecida a la geometría aleatoria.

Con lo anterior se pueden agrupar las geometrías en dos grupos, según su distribución del campo de velocidad. Un grupo que considera las geometrías A, E y F, y otro que considera las geometrías B, C y D.

Conductividad Hidráulica

Con la ecuación de Darcy es posible determinar la conductividad hidráulica conociendo la velocidad media y el gradiente hidráulico en un volumen de control representativo (REV). En este caso se utilizó un REV que considera toda el área transversal al flujo y va aumentando en función de la distancia. En la Figura 5c se muestra la conductividad hidráulica de todas las geometrías en función del número de granos.

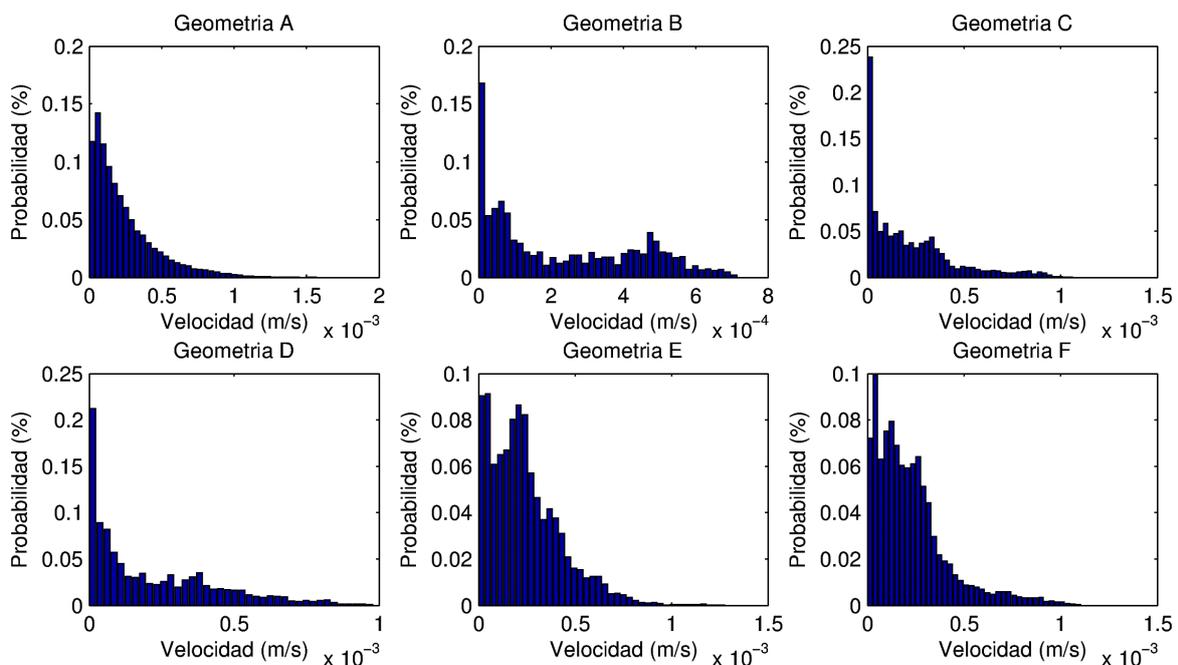


Figura 4. Distribución de la magnitud de la velocidad del flujo para las distintas geometrías analizadas. Para el caso aleatorio se muestra solamente una geometría.

De acuerdo a la Figura 5c cuando la conductividad hidráulica se promedia sobre 5 granos su valor comienza a oscilar entorno a su valor medio, y cuando se consideran alrededor de 10-15 granos según la geometría, el valor se estabiliza, lo que nos entrega un primer indicador de la escala a la cual las propiedades efectivas del medio comienzan a ser válidas.

Se puede ver que la mayor conductividad hidráulica la tiene el medio simétrico traslapado horizontalmente (Geometría B). Esto se debe a que existen menores pérdidas de energía en este medio. El campo de velocidad (Figura 3) de esta geometría tiene los canales de flujos

con menor variación y ensanchamiento, lo que indica que existen menores pérdidas de energía, las cuales ocurren principalmente debido a los ensanchamientos.

En los otros medios la conductividad hidráulica presenta poca variación, tomando mayor valor en los medios con solo un tamaño de grano. En el caso de los medios con más de un tamaño de grano (Geometría A, D y F) el valor es prácticamente el mismo.

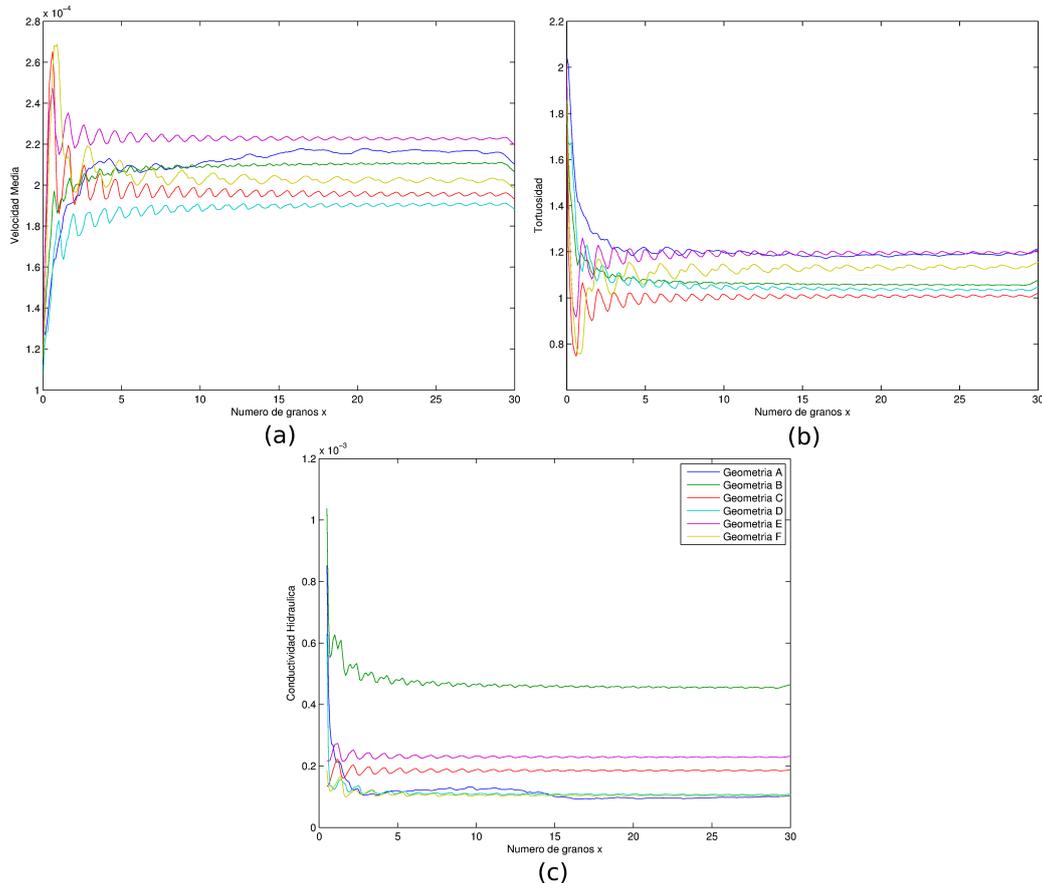


Figura 5. Velocidad media (a), tortuosidad (b) y conductividad hidráulica (c), calculadas para los distintos de campos velocidad simulados en función del número de granos que definen el volumen de control representativo.

Tortuosidad y Velocidad Media

Utilizando la metodología propuesta por [Matyka and Koza, 2012] se estimó la tortuosidad de un medio conociendo la magnitud de la velocidad promedio y la velocidad promedio en la dirección transversal al flujo. Al igual que en la sección precedente, se utilizó un REV que considera toda la vertical y va aumentando en el eje horizontal, de tal forma que es posible calcular la tortuosidad en función del número de granos. En la Figura 5b se muestran los resultados obtenidos para cada geometría.

Las Figuras 5a y 5b muestran que al igual que para la conductividad hidráulica, cuando el REV considera 5 granos la tortuosidad y velocidad comienzan a oscilar entorno a su valor

medio, mientras que al considerar entre 10-15 granos según la geometría, se puede ver que los valores se estabilizan.

Como es de esperar la menor tortuosidad se obtiene para el medio ordenado (Geometría B), donde sus líneas de corriente son prácticamente horizontales (tortuosidad muy cercana a 1), mientras que la mayor ocurre para los medios aleatorios (Geometría A).

Por otro lado la tortuosidad es mayor en los medios traslapados verticalmente (Geometrías E y F), que en los traslapados horizontalmente (Geometrías B y D). Esto ocurre, ya que al traslapar los granos verticalmente se “fuerza” a que las líneas de corriente ya no sean horizontales sino que sinusoidales.

En las Figuras 5b y 5c se puede apreciar la relación que existe entre la tortuosidad y velocidad media. Medios más tortuosos tienden a tener mayores velocidades medias bajo las mismas condiciones de borde, debido a la presencia de canales preferenciales de flujo que conectan los bordes izquierdo y derecho con una menor pérdida de energía.

ENFOQUE LAGRANGIANO

El enfoque lagrangiano consiste en seguir una partícula registrando su posición y tiempo para caracterizar las propiedades de su movimiento. Para esto se realizó un rastreo de partículas (“particle tracking”) en una malla no estructurada, para lo cual se implementó el algoritmo propuesto por Zang et al. (2012). En la Figura 2 se pueden ver 10 líneas de corriente generadas para una parte de un medio aleatorio

Para estudiar las propiedades del flujo desde un punto de vista lagrangiano se calcularon 100 líneas de corriente para cada geometría.

Dispersión

De Anna et al. (2013) propone estudiar la presencia de transporte anómalo a la escala de poros, analizando la dispersión hidrodinámica puramente advectiva. La dispersión hidrodinámica se asocia al segundo momento espacial del desplazamiento en la dirección del flujo (x en este caso) de un conjunto de partículas, es decir:

$$\sigma_x^2(t) = \langle [\Delta x(t) - \langle \Delta x(t) \rangle]^2 \rangle$$

donde, $\Delta x(t) = x(t) - x(0)$.

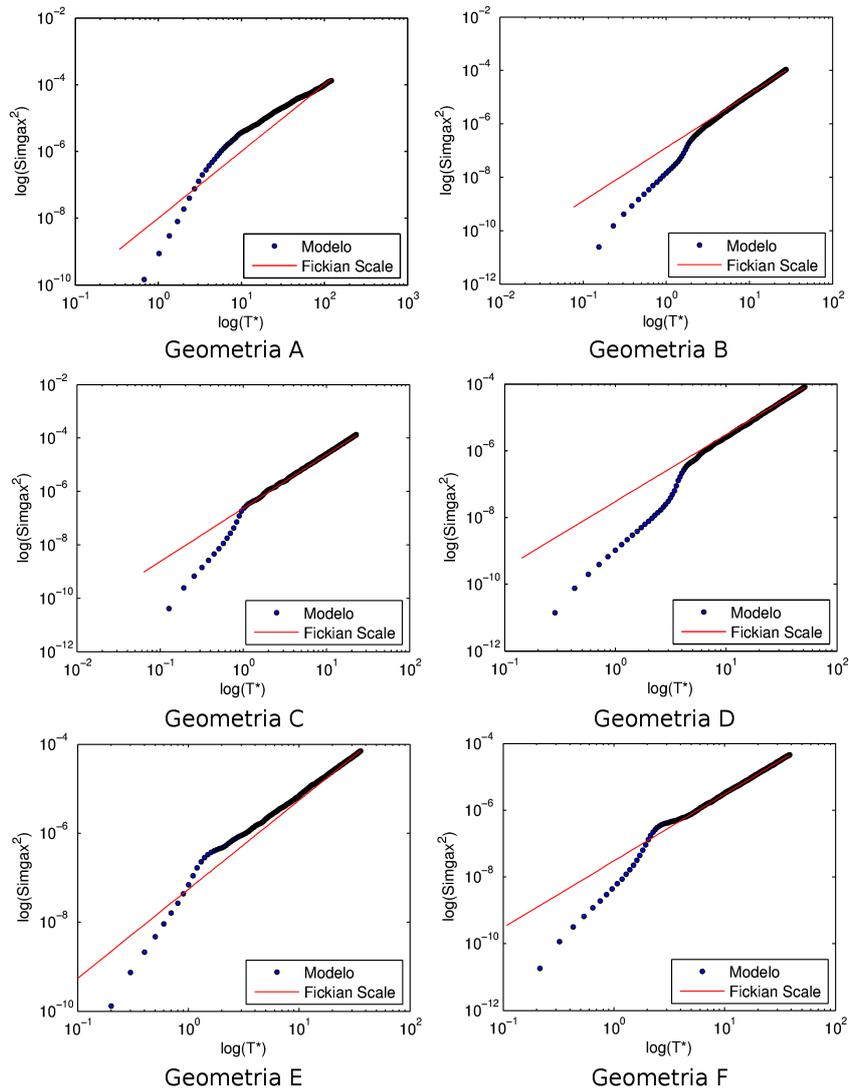


Figura 6. Comparación de resultados de simulaciones para segundo momento espacial con modelo de Fick para difusión. Círculos corresponden a los resultados de las simulaciones numéricas y la línea roja indica la pendiente estimada a partir del modelo teórico. T^* corresponde al tiempo normalizado con el diámetro medio y velocidad media estimada para cada geometría.

$$T^* = \frac{T}{d_m/V_m}$$

En procesos de transporte que pueden modelarse de acuerdo a la Ley de Fick, por ejemplo difusión o dispersión, el logaritmo del segundo momento espacial escala con $t^{1/2}$. En la Figura 6 se comparan los valores obtenidos de las simulaciones numéricas para cada geometría con la curva teórica. En el caso de la geometría aleatoria el gráfico mostrado corresponde al promedio de las cinco geometrías. Con excepción de la geometría A, todas

las geometrías muestran un buen ajuste con el modelo teórico después de cierto tiempo de viaje.

Correlación de velocidades

Siguiendo el análisis utilizado por Le Borgne et al. (2011), analizamos la correlación de las velocidades a lo largo de una línea de corriente para caracterizar las propiedades de transporte de los distintos campos de velocidad. En la Figura 7 se muestran los resultados obtenidos.

La Figura 7 muestra que para la geometría A existe correlación para cortas distancias a lo largo de una misma línea de corriente, pero se hace nula rápidamente. Considerando la distribución de esta geometría este resultado es esperable, ya que en este caso existe correlación de las velocidades dentro de un canal de flujo, la que luego se hace nula al entrar a otro canal de flujo el que no tiene relación con el anterior debido a que es una geometría aleatoria.

En el caso de las geometrías simétricas existe mayor correlación debido a que las velocidades se van repitiendo en la línea de corriente, por lo que dado cierta distancia se vuelve a la misma velocidad obteniendo una correlación perfecta. Con esto una partícula que tiene una velocidad alta, es más probable que siga alcanzando velocidades altas más adelante. En el caso de una partícula que se encuentra en una zona de estancamiento (velocidades bajas) es más probable que más adelante se encuentra nuevamente en una zona de estancamiento.

La Figura 7 muestra que en las geometrías simétricas la correlación promedio (línea roja), también se hace nula. Esto ocurre porque la distancia en que la correlación es perfecta varía en cada partícula, siendo más alta en las partículas que se mueven por las zonas de estancamiento, las cuales siguen un movimiento más sinusoidal que las partículas que van por el centro del canal. Por lo anterior, la correlación de las partículas se va desfasando, por lo que al promediar esta se va amortiguando y convergiendo a cero.

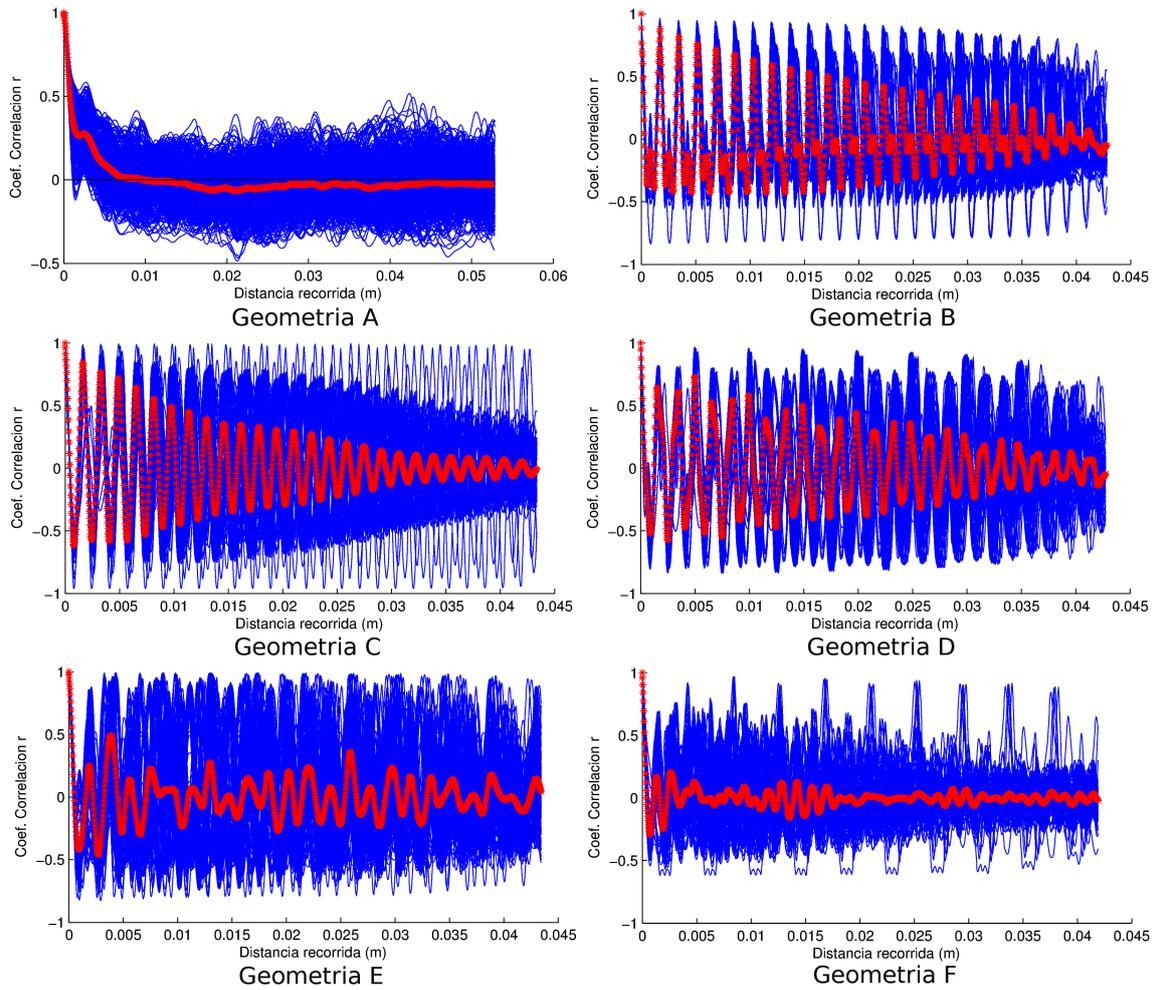


Figura 7. Coeficientes de correlación. Líneas azules corresponden al cálculo de la correlación de cada partícula y la roja al promedio de todas las partículas. En el caso de la geometría aleatoria la línea roja corresponde al promedio en todas las geometrías.

CONCLUSIONES

La primera conclusión importante que se puede ver en los resultados obtenidos es que las propiedades efectivas que describen procesos de flujo y transporte de un medio poroso no son independientes de la estructura del medio a la escala de poros. Por lo tanto, es fundamental encontrar relaciones que permitan obtener parámetros efectivos a la escala de Darcy que consideren la estructura del medio, ya que resolver el flujo y transporte a escala de poro no es viable en aplicaciones prácticas. Por lo anterior, se espera que al estudiar el transporte de calor, el cual es la motivación principal del presente trabajo, en estos medios se obtengan resultados distintos para cada geometría.

Del análisis de la distribución de velocidad obtenida para cada geometría se agrupan estas distribuciones en dos grupos. Geometrías A, E y F que muestran una distribución log-normal y las geometrías B, C y D que muestran una distribución bimodal. Con esto se desprende que la alteración de la posición de los granos en la dirección transversal al flujo (dirección vertical) pareciera ser fundamental en la distribución de velocidad obtenida.

A partir del análisis euleriano se concluye que en las simulaciones realizadas se alcanzan propiedades efectivas para caracterizar el flujo en escalas de 10 a 15 granos, según la geometría analizada. Lo anterior significa que a pequeñas distancia parece ser posible trabajar con propiedades efectivas del medio y dejar de lado las simulaciones a escala de poros si es que se logra determinar los parámetros adecuados para caracterizar la geometría del suelo. En el futuro se analizara a que escala se hacen efectivas las propiedades efectivas de transporte y si esta escala tiene alguna relación con la calculada en este trabajo.

La correlación en las velocidades Lagrangianas es fundamental para caracterizar las propiedades de transporte de un campo de velocidades (Le Borgne et al., 2011). El hecho de que los campos de velocidades simulados muestren distintas correlaciones indica que los fenómenos de transporte para las distintas geometrías, no sean completamente equivalentes. Por ejemplo, los canales preferenciales que se observan en los campos generados a partir de las geometrías aleatorias en conjunto con la correlación de la velocidad durante mayores distancias, indican que para este tipo de geometría podría ser necesarios utilizar modelos más complejos de transporte a la escala de Darcy, tales como modelos correlacionados del tipo continuos time random walk (CTWR). Esto parece confirmarse a partir de la Figura 6, la cual muestra que en el caso de la geometría aleatoria existe transporte anómalo que no se ajusta al comportamiento del modelo teórico basado en la ley de Fick. La conclusión anterior puede tener consecuencias importantes en el estudio del transporte de calor y solutos. Como trabajo futuro se analizará cómo se comporta el transporte de calor en estos medios para verificar la hipótesis anterior.

AGRADECIMIENTOS

El primer autor agradece el financiamiento de beca de Magister : CONICYT-PCHA/MagisterNacional/2014-22141244. P. Herrera agradece el apoyo del proyecto CONICYT-Fondap #15090013 Centro de Excelencia en Geotermia de los Andes.

REFERENCIAS

Bons, P. D., van Milligen, B. P., & Blum, P. (2013). *A general unified expression for solute and heat dispersion in homogeneous porous media. Water Resources Research, 49(10), 6166-6178.*

Blunt, M. J. (2001). *Flow in porous media—pore-network models and multiphase flow. Current opinion in colloid & interface science, 6(3), 197-207.*

De Anna, P., Le Borgne, T., Dentz, M., Tartakovsky, A. M., Bolster, D., & Davy, P. (2013). *Flow intermittency, dispersion, and correlated continuous time random walks in porous media. Physical review letters, 110(18), 184502.*

Le Borgne, T., Bolster, D., Dentz, M., Anna, P., & Tartakovsky, A. (2011). *Effective pore scale dispersion upscaling with a correlated continuous time random walk approach. Water Resources Research, 47(12).*

Matyka, M., & Koza, Z. (2012). *How to calculate tortuosity easily?. arXiv preprint arXiv:1203.5646.*

Øren, P. E., & Bakke, S. (2003). *Reconstruction of Berea sandstone and pore-scale modelling of wettability effects. Journal of Petroleum Science and Engineering, 39(3), 177-199.*

Rau, G. C., Andersen, M. S., & Acworth, R. I. (2012). *Experimental investigation of the thermal dispersivity term and its significance in the heat transport equation for flow in sediments. Water Resources Research, 48(3).*

Rau, G. C., Andersen, M. S., McCallum, A. M., Roshan, H., & Acworth, R. I. (2014). *Heat as a tracer to quantify water flow in near-surface sediments. Earth-Science Reviews, 129, 40-58.*

Zhang, Y., King, M. J., & Datta & Gupta, A. (2012). *Robust streamline tracing using inter cell fluxes in locally refined and unstructured grids. Water Resources Research, 48(6).*

Zhu, Y., & Fox, P. J. (2002). *Simulation of pore-scale dispersion in periodic porous media using smoothed particle hydrodynamics. Journal of Computational Physics, 182(2), 622-645.*