DIFUSION Y TRANSPORTE REACTIVO EN MEDIO POROSO CON SPH

Carlos Alvarado

Estela Mayoral

Ourense Abril, 2014

Implementación de la ecuación de difusión en SPH

Consideraciones.

Concentraciones bajas.

 $\mathrm{d}C/\mathrm{d}t = D\nabla^2 C,$

- Viscosidad constante.
- Densidad Constante.

$$\frac{\mathrm{d}C_i}{\mathrm{d}t} = \sum_{j \in \mathrm{fluid}} \frac{(D_i n_i + D_j n_j)(C_i - C_j)}{n_i n_j (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h)$$

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + 0.5 \Delta t^2 \mathbf{a}_i(t),$$

$$C_i(t + \Delta t) = \left[C_i(t) + 0.5 \Delta t \left\{ \frac{\mathrm{d}C_i(t)}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}C_i(t + \Delta t)}{\mathrm{d}t} \right\} \right],$$

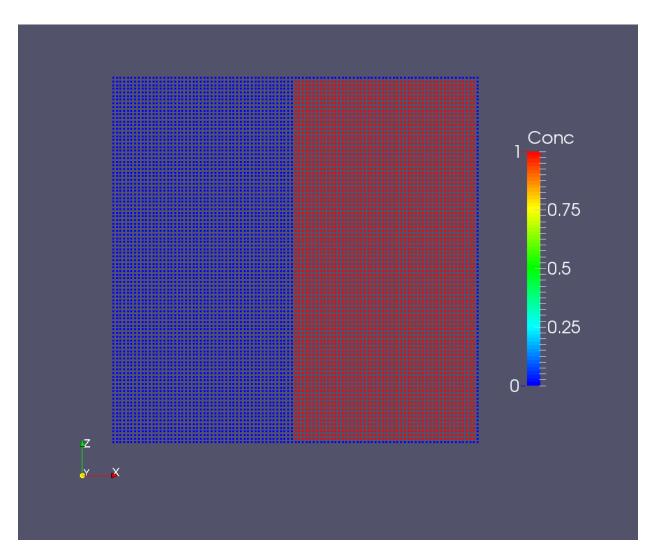
and

$$\mathbf{v}_i(t+\Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + 0.5\Delta t \{\mathbf{a}_i(t) + \mathbf{a}_i(t+\Delta t)\}.$$

Tartakovsky (2007)

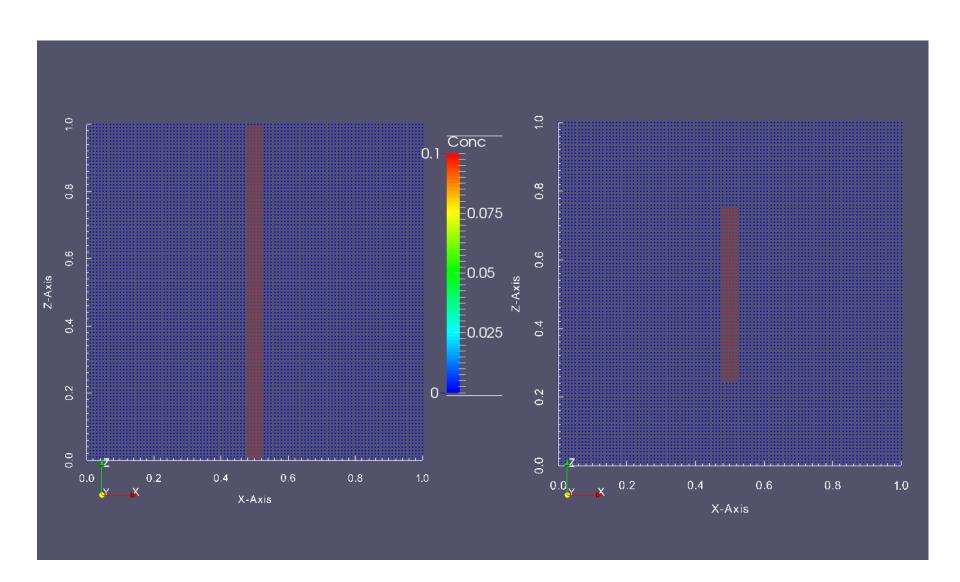
Difusión Simple

- Caso 1.
- Concentración A CAo= 1 Concentración B CBo= 0

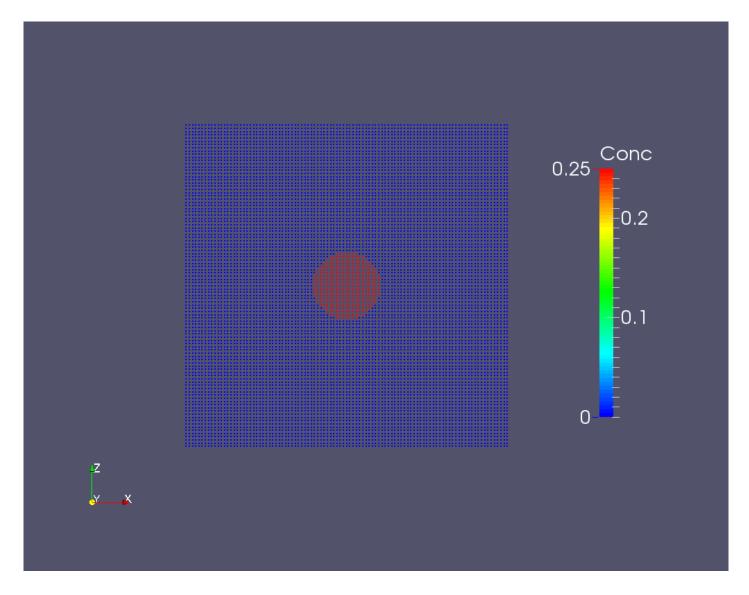


Difusión simple

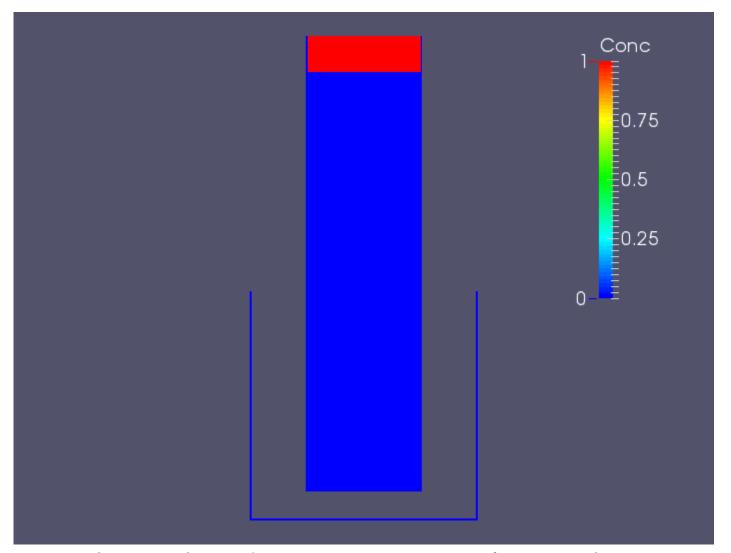
Barra 1 de concentración Co = 0.1 Barra 2 de concentración Co =0. 1



Difusión simple: círculo Co= 1



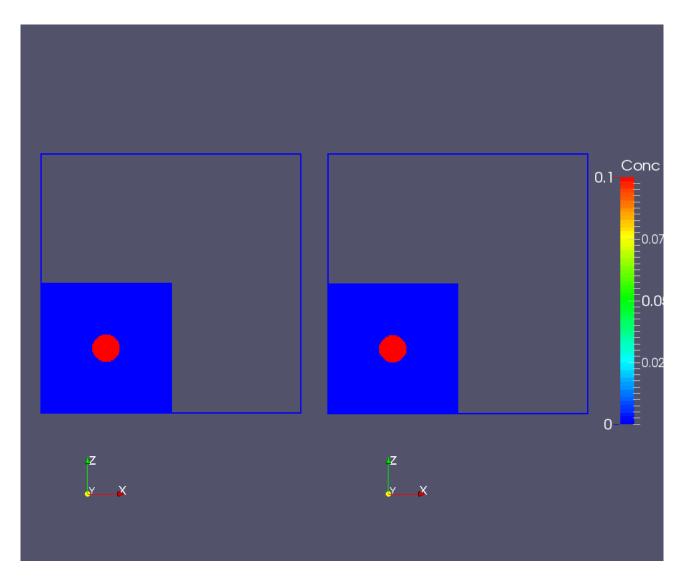
DIFUSION EN FASE MOVIL



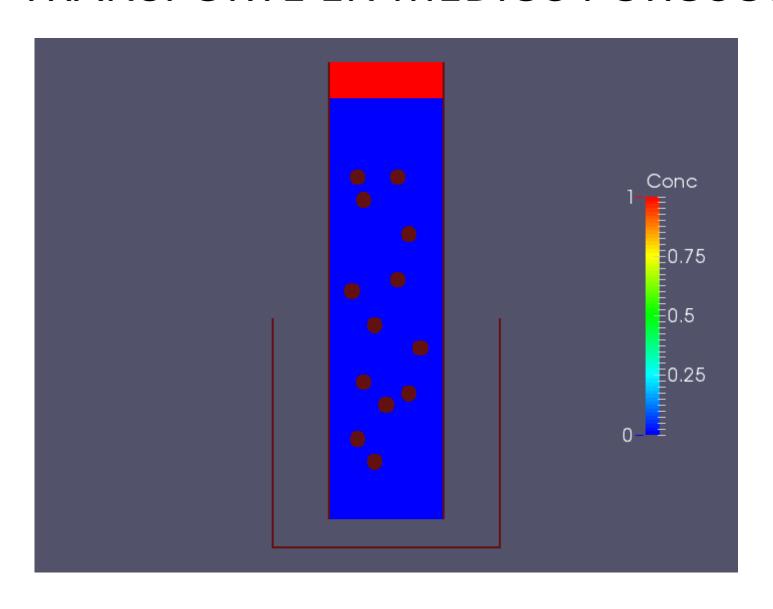
Caso 1. Columna liquida con concentración inicial Co=1

DIFUSION EN FASE MOVIL

Caso 2. "Dambreak" con concentración inicial Co=0.1 D1 = 0.01 D2 = 0.1



TRANSPORTE EN MEDIOS POROSOS



DECAIMIENTO RADIACTIVO

 Cambio de Concentración por difusión con decaimiento radiactivo.

$$-\frac{dN}{dt} = \lambda N \qquad \frac{dN}{N} = -\lambda \, dt \qquad N = N_0 \, e^{-\lambda t}$$

$$\frac{dN}{N} = -\lambda dt$$

$$N = N_0 e^{-\lambda t}$$

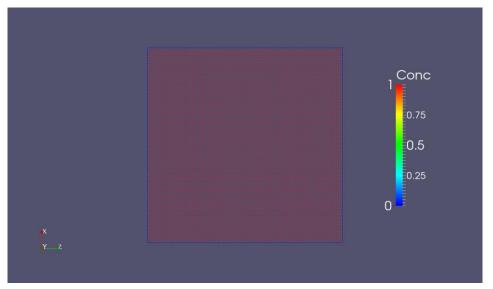
$$\frac{\mathrm{d}C_i}{\mathrm{d}t} = \sum_{j \in \mathrm{fluid}} \frac{(D_i n_i + D_j n_j)(C_i - C_j)}{n_i n_j (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot \nabla_i W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j, h) - R \sum_{k \in \mathrm{solid}} (C_i - C_{\mathrm{eq}}) \delta_{ik},$$

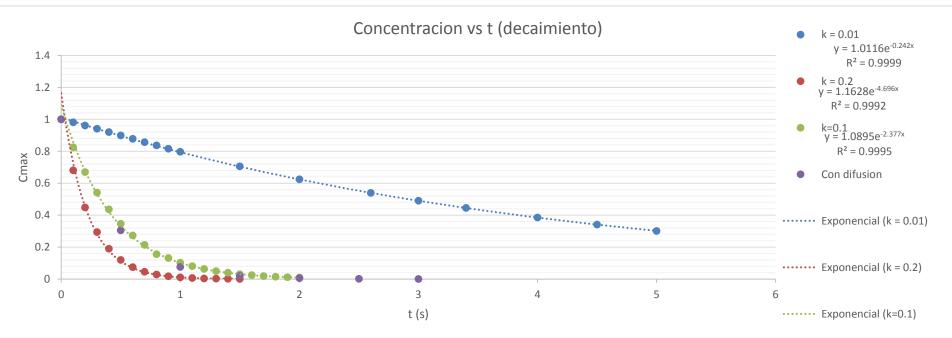
• Ci-Ceq = -N

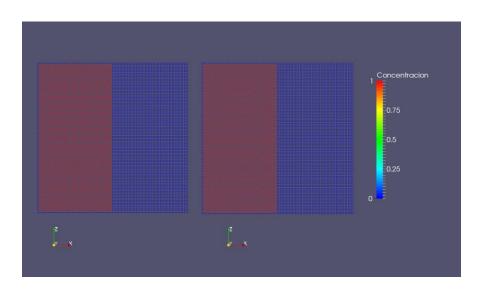
• R = kl

Consideraciones: no hay cambio de masa.

Decaimiento sin difusión



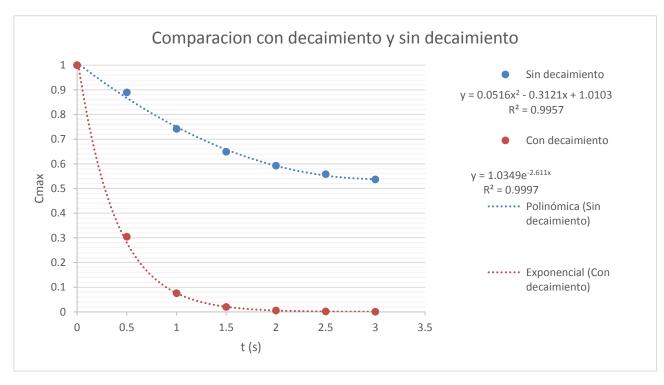




Comparación

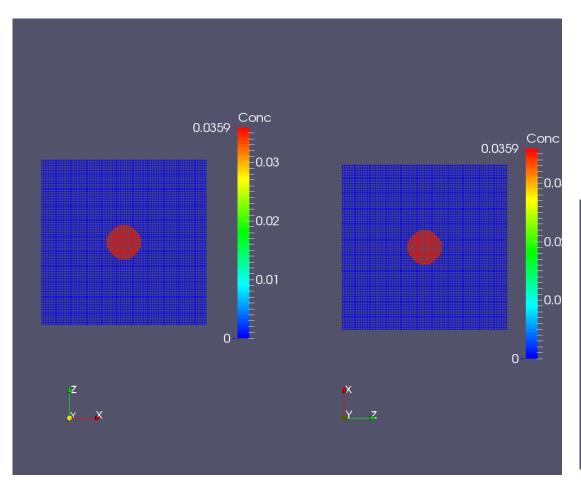
Caso a: difusión sin decaimiento

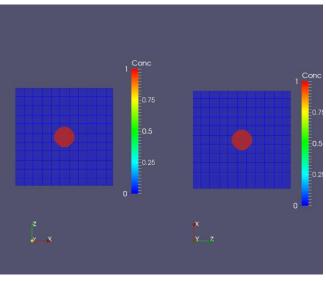
Caso b: difusión con decaimiento



DIFUSION Y DECAIMIENTO RADIACTIVO

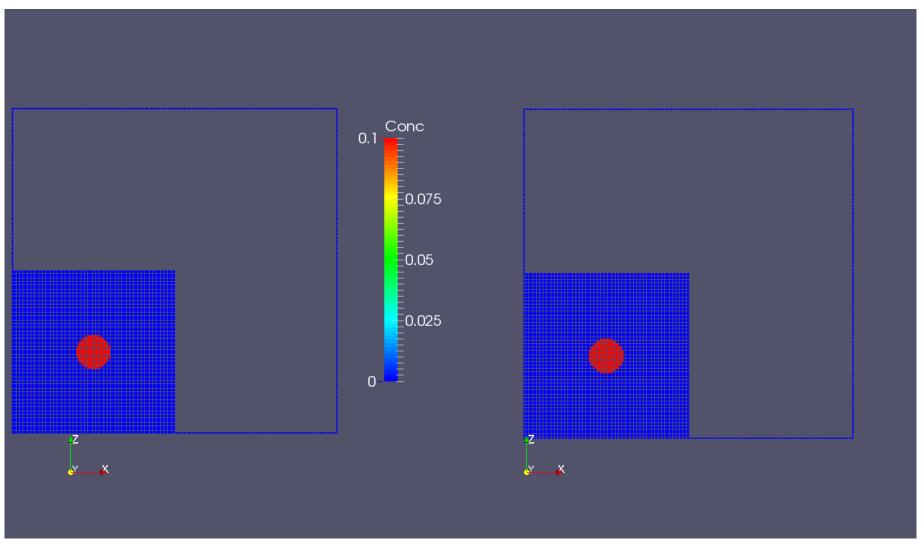
- · Caso 1. Difusión.
- Caso 2. Difusión y decaimiento



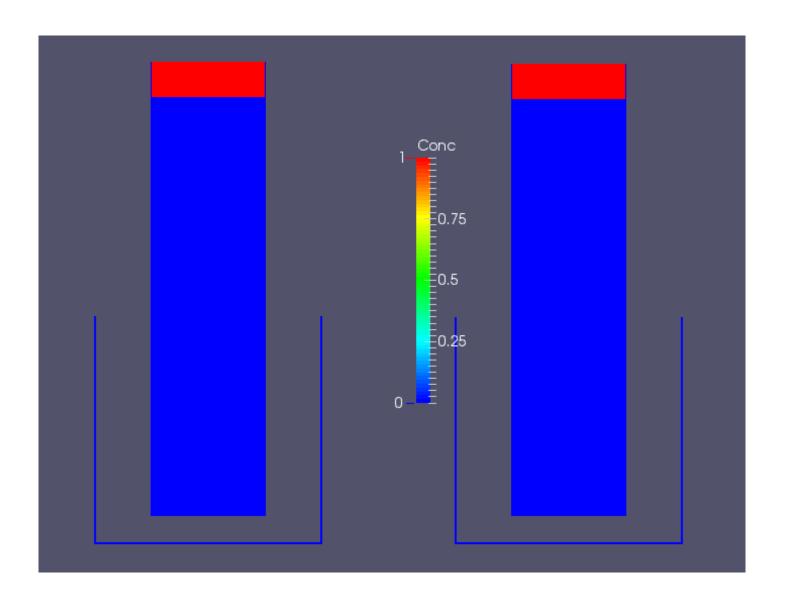


Difusión en fase móvil con decaimiento

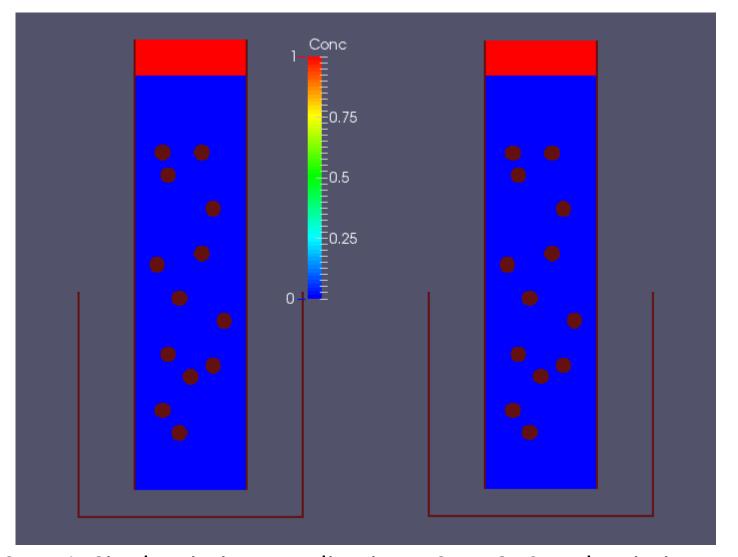
Caso 2. "Dambreak" con concentración inicial Co=0.1 lambda = 0.01 lambda = 0.0



Columna con decaimiento



TRANSPORTE DE RADIONUCLIDOS EN MEDIOS POROSOS



Caso 1. Sin decaimiento radiactivo Caso 2. Con decaimiento radiactivo

FIN

• Gracias!

