

MODELLAZIONE NUMERICA DEL PROCESSO DI EVAPORAZIONE IN MISCELE CEMENTO-BENTONITE

Vincenzo Sergio Vespo

Politecnico di Torino, Dipartimento di Ingegneria Strutturale, Edile e Geotecnica (DISEG)
vincenzosergio.vespo@polito.it

Guido Musso

Politecnico di Torino, Dipartimento di Ingegneria Strutturale, Edile e Geotecnica (DISEG)
guido.musso@polito.it

Giulia Guida

Università degli Studi di Roma Tor Vergata, Dipartimento di Ingegneria Civile e Ingegneria Informatica (DICII)
giulia.guida@uniroma2.it

Gabriele Della Vecchia

Politecnico di Milano, Dipartimento di Ingegneria Civile e Ambientale (DICA)
gabriele.dellavecchia@polimi.it

Sommario

I diaframmi plastici in cemento-bentonite sono una soluzione ingegneristica molto diffusa per la cinturazione idraulica e la loro durabilità nel tempo è un prerequisito essenziale per il contenimento degli inquinanti solubili ed insolubili in acqua. Nonostante la normativa si concentri esclusivamente sul comportamento idraulico del materiale saturo, la porzione più superficiale dell'opera è soggetta all'interazione con l'atmosfera, con fenomeni di evaporazione ed infiltrazione che possono comportare la desaturazione e risaturazione, e influenzarne in maniera significativa il comportamento idro-meccanico, anche con la comparsa di fratture indotte dal ritiro. La presente nota descrive un modello termoidraulico per i processi di evaporazione e imbibizione per le miscele cemento-bentonite. Il modello, implementato nel codice agli elementi finiti COMSOL Multiphysics[®], è stato utilizzato per la simulazione di esperimenti in piccola scala condotti in laboratorio su un campione colonnare, e ha consentito una buona riproduzione dei risultati sperimentali.

1. Introduzione

Le miscele cemento-bentonite sono ampiamente utilizzate in diverse applicazioni geotecniche tra cui i diaframmi plastici per il contenimento di inquinanti miscibili o immiscibili nelle falde acquifere sotterranee (Evans & Ruffing, 2017). In diversi casi, la falda acquifera può essere soggetta a fluttuazioni nel tempo dovute a cause naturali e antropiche, causando cicli di desaturazione/imbibizione di una porzione dei manufatti (Wu *et al.*, 2019). Inoltre, la sommità dei diaframmi è spesso esposta all'atmosfera, rendendo tali opere soggette a processi di evaporazione e infiltrazione che ci si attende possono portare a modifiche dello stato idraulico del materiale e ad una riduzione dell'efficacia complessiva delle barriere, in analogia a quanto accade per i composti terreno-bentonite (Malusis *et al.*, 2011).

In questa nota viene proposto un modello accoppiato termoidraulico in grado di riprodurre la desaturazione e risaturazione delle miscele cemento-bentonite soggette a fenomeni di evaporazione e imbibizione. Le previsioni del modello sono state confrontate con risultati sperimentali ottenendo un buon riscontro. Ciò suggerisce che la formulazione proposta tiene conto correttamente dei processi fisici considerati e potrebbe essere utilizzata per modellare il comportamento in scala reale dei diaframmi plastici.

2. Materiale e preparazione campione

La miscela cemento-bentonite utilizzata in questo studio è stata preparata impiegando cemento CEM I 32.5 N-Portland 325 e bentonite sodica-calcica, fornita da Leviosa Chimica Mineraria (Livorno). La miscela è stata preparata con un rapporto di massa acqua-bentonite 18:1 e un rapporto di massa cemento-bentonite 4:1, depositata in un cilindro di plexiglas avente altezza 300 mm e diametro 130 mm, e quindi lasciata maturare in acqua per 28 giorni. A seguito della maturazione si sono misurati il peso specifico dei grani ($G_s = 2.68$), il contenuto d'acqua medio ($w = 290\%$) e la conducibilità idraulica ($K_w^{sat} = 10^{-8}$ m/s). L'indice dei vuoti è risultato variare monotonicamente lungo l'altezza del provino, con valori compresi tra 6.9 (base del provino) e 8.3 (testa del provino). Di conseguenza, anche la distribuzione iniziale del contenuto in acqua gravimetrico non è uniforme.

3. Prova di evaporazione/imbibizione

La prova di evaporazione è stata condotta esponendo la superficie superiore del provino all'ambiente di laboratorio (temperatura T_{amb} pari a 21 °C e umidità relativa h_r pari a 0.38). La successiva imbibizione è stata effettuata immergendo il provino in 40 mm di acqua e consentendo un libero flusso d'acqua in ingresso nel campione attraverso la base. La fase di evaporazione è durata 13 giorni, a cui sono seguiti 2 giorni di imbibizione.

La tecnica della tomografia elettrica è stata impiegata per monitorare l'evoluzione temporale e spaziale del contenuto d'acqua nel campione di cemento-bentonite durante la prova. Per tale scopo, è stata definita una legge empirica che mette in relazione la conducibilità elettrica e il contenuto d'acqua del mezzo poroso (Zibisco, 2019). La rilevazione della conducibilità elettrica è stata effettuata mediante 16 elettrodi posizionati lungo la circonferenza del provino a 3 diverse quote.

4. Modellazione numerica del processo di evaporazione

L'evaporazione è un processo che coinvolge il trasferimento simultaneo di massa d'acqua ed energia termica, durante il quale possono verificarsi deformazioni del materiale. Nel modello proposto il fenomeno dell'evaporazione è descritto con un sistema accoppiato di equazioni differenziali costituito da un bilancio di massa dell'acqua e da un bilancio di energia. L'effetto sulla capacità di ritenzione del materiale dovuto al comportamento deformativo è stato tenuto in conto formulando la curva di ritenzione idrica in termini di contenuto in acqua volumetrico θ_v .

4.1 Bilancio della massa d'acqua

Nella formulazione del modello matematico del processo di evaporazione risulta conveniente scrivere i bilanci di massa dei fluidi in termini di specie chimiche (acqua e aria) piuttosto che di fasi (liquida e gassosa) (si veda ad es. Bear & Cheng, 2010). Per semplicità, si sono introdotte le seguenti ipotesi: i) la pressione dell'aria è stata considerata costante nello spazio e nel tempo, ii) il flusso dispersivo di vapore acqueo è considerato trascurabile, iii) la frazione di massa dell'aria disciolta nella fase liquida è considerata trascurabile. Pertanto, il bilancio di massa dell'aria è automaticamente soddisfatto, mentre il bilancio di massa dell'acqua è dato da:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi (S_l \rho_l + S_g c_g^w)] + \nabla \cdot (\rho_l \mathbf{q}_l) + \nabla \cdot (\phi S_g \mathbf{J}_g^w) = 0 \quad (1)$$

dove ϕ è la porosità, S_l e S_g sono rispettivamente il grado di saturazione della fase liquida e gassosa ($S_l + S_g = 1$), c_g^w è la concentrazione in massa dell'acqua in fase gassosa, ρ_l è la densità dell'acqua in fase liquida, \mathbf{q}_l è il flusso convettivo della fase liquida, \mathbf{J}_g^w è la somma del flusso diffusivo e dispersivo dell'acqua in fase gassosa.

Il flusso convettivo di acqua liquida in un mezzo poroso parzialmente saturo è espresso mediante la legge di Darcy generalizzata:

$$\mathbf{q}_l = -\frac{\mathbf{K}_w^{sat} \cdot k_r}{\rho_l g} \nabla(u_w + \rho_l g z) \quad (2)$$

dove \mathbf{K}_w^{sat} è la conducibilità idraulica in condizioni sature e k_r è la permeabilità relativa. Quest'ultima dipende dal grado di saturazione efficace del materiale e nel modello si è utilizzata la formulazione proposta in Van Genuchten (1980).

Il flusso diffusivo di vapore acqueo in un mezzo poroso non saturo è invece espresso dalla legge di Fick:

$$\mathbf{J}_g^w = -(D_v \cdot \boldsymbol{\tau}) \nabla c_g^w \quad (3)$$

dove D_v è il coefficiente di diffusione del vapore acqueo in aria e $\boldsymbol{\tau}$ è il tensore di tortuosità. D_v è definito secondo la formulazione proposta in Kimball *et al.* (1976) in funzione della temperatura, mentre $\boldsymbol{\tau}$ tiene conto della tortuosità del percorso delle molecole di vapore acqueo attraverso il mezzo poroso e nel modello è stato definito secondo Lai *et al.* (1976).

La relazione che lega il contenuto in acqua volumetrico \mathcal{G}_w con la suzione di matrice è data dalla curva di ritenzione idrica, esplicitata nel modello mediante la formulazione di van Genuchten (1980):

$\mathcal{G}_w = \left[1 + (\alpha s)^n\right]^{-m}$; dove α , n and m sono i parametri del modello e $s = u_a - u_w$ è la suzione di matrice pari alla differenza tra la pressione del fluido non bagnante (in questo caso aria) e del fluido bagnante (in questo caso acqua liquida). I valori dei parametri del modello di van Genuchten (1980), ottenuti dall'interpretazione dei dati sperimentali (Trischitta *et al.*, 2020), sono sintetizzati in Tab 1.

Tab 1. Parametri del modello di van Genuchten (1980) per le curve di ritenzione idrica

	Main drying	Main wetting
α [1/MPa]	0.38	20
n [-]	2.05	0.98
m [-]	0.73	0.70

La concentrazione di vapore acqueo è invece correlata all'umidità relativa h_r e alla suzione totale ψ mediante la legge psicometrica:

$$c_g^w = c_{g,sat}^w \cdot h_r = \frac{p_{v,sat} M_w}{RT} e^{-\frac{\psi M_w}{\rho_l RT}} \quad (4)$$

dove $c_{g,sat}^w$ è la concentrazione di vapore acqueo in condizioni di saturazione, M_w è il peso molare dell'acqua, R è la costante universale dei gas perfetti e $p_{v,sat}$ è la pressione di vapore in condizioni di saturazione (nel modello si è utilizzata la relazione esposta in Tindall *et al.*, 1998). Assumendo che la suzione osmotica e la pressione dell'aria rimangano costanti nel tempo e nello spazio, si ha che $\Delta\psi = \Delta s = -\Delta u_w$.

4.2 Bilancio di energia

L'equazione di bilancio dell'energia di un mezzo poroso soggetto a processi di evaporazione/imbibizione può essere così espressa (Gens, 2010):

$$\frac{\partial}{\partial t} (E_s \rho_s (1-\phi) + E_l \rho_l S_l \phi + E_g \rho_g S_g \phi) + \nabla \cdot (\mathbf{i}_c + \mathbf{j}_{E_l} + \mathbf{j}_{E_g}) = 0 \quad (5)$$

dove $E_s = c_{p,s} T$, $E_l = c_{p,l} T$, $E_g = c_{p,g} T + L_w$ rappresentano l'energia immagazzinata nella fase solida, liquida e gassosa rispettivamente. Esse dipendono dalle corrispettive capacità termiche ($c_{p,s}$, $c_{p,l}$, $c_{p,g}$) e dal calore latente di evaporazione L_w . I meccanismi di trasporto del calore si identificano nella conduzione \mathbf{i}_c e

nella convezione di calore sensibile legata al flusso di acqua liquida \mathbf{j}_{E_l} e di vapore acqueo \mathbf{j}_{E_g} :

$$\begin{aligned} \mathbf{i}_c &= -\lambda \nabla T \\ \mathbf{j}_{E_l} &= E_l \mathbf{q}_l \\ \mathbf{j}_{E_g} &= E_g \mathbf{J}_g^w \end{aligned} \quad (6)$$

dove $\lambda = \left[(1-\phi) \sqrt{\lambda_s} + \phi S_l \sqrt{\lambda_l} + \phi (1-S_l) \sqrt{\lambda_g} \right]^2$ (Cosenza *et al.*, 2003) è la conducibilità termica del mezzo poroso. λ_s , λ_l , λ_g sono rispettivamente le conducibilità termiche della fase solida, liquida e gassosa. In Tab 2 si riportano i valori di capacità e conducibilità termiche impiegati nel modello.

Tab 2. Capacità e conducibilità termiche impiegati nel modello

$c_{p,s}$ [J/(kg·K)]	$c_{p,l}$ [J/(kg·K)]	$c_{p,g}$ [J/(kg·K)]	λ_s [W/(m·K)]	λ_l [W/(m·K)]	λ_g [W/(m·K)]
1107	4182	2062	1.345	0.6	0.024

4.3 Condizioni al contorno e iniziali

Volendo simulare con un modello monodimensionale la prova di evaporazione, si è posta una condizione al contorno di flusso d'acqua nullo alla base mentre in testa è stato applicato il flusso di vapore acqueo correlato al processo di evaporazione. Tale flusso dipende dalla velocità di evaporazione reale AE ed è espressa dalla legge di Dalton (Gray, 1970):

$$q_{evap} = \rho_l AE = \rho_l PE \frac{p_{v,soil} - p_{v,amb}}{p_{v,sat} - p_{v,amb}} \quad (7)$$

dove PE è la velocità di evaporazione di uno specchio d'acqua o di una superficie satura, $p_{v,soil} = p_{v,sat}(T) \cdot h_r(T)$ è la pressione del vapore acqueo nel solido (correlata alla temperatura del mezzo poroso T), $p_{v,amb} = p_{v,sat}(T_{amb}) \cdot h_r(T_{amb})$ è la pressione di vapore dell'ambiente. PE è stata determinata sperimentalmente, risultando pari a 2.58 mm/giorno, ponendo dell'acqua in un cristallizzatore nell'ambiente di laboratorio e monitorando il peso del volume d'acqua con una bilancia di precisione.

In fase di imbibizione, è stata invece modificata la condizione al contorno alla base del provino imponendo un carico idraulico corrispondente a 40 mm di acqua.

Come condizioni iniziali è stata considerata una distribuzione idrostatica della pressione del fluido e una temperatura del provino pari alla temperatura ambientale.

Le condizioni al contorno impiegate per il bilancio di energia sono di temperatura costante, pari alla temperatura ambientale, alla base del provino, mentre in testa è stato applicato il flusso di calore associato al processo di evaporazione, che essendo endotermico causa una riduzione della temperatura del solido in prossimità del fronte di evaporazione dove si verifica il cambio di stato. Il flusso termico imposto alla testa del provino è il seguente (Ralaizafisolovony *et al.*, 2020):

$$q_{heat} = -L_w q_{evap} + \varepsilon_s \sigma (T_{amb}^4 - T^4) \quad (8)$$

dove σ è la costante di Stefan-Boltzmann e ε_s è l'emissività del solido, correlata col contenuto d'acqua secondo la formulazione presentata in Van Bavel & Hillel (1976).

5. Simulazione numerica

Il modello numerico della prova di evaporazione/imbibizione è stato implementato sul codice agli

elementi finiti COMSOL Multiphysics®. La simulazione è stata eseguita sia implementando solo il bilancio di massa dell'acqua (modello idraulico H), sia considerando un modello accoppiato termoidraulico che considerasse anche il bilancio di energia (modello TH).

La Fig 1 mostra il confronto tra l'evoluzione temporale del contenuto d'acqua ricavato sperimentalmente e quella ottenuta mediante simulazioni numeriche. Le previsioni sia del modello H che del modello TH, sono in grado di simulare correttamente la desaturazione del campione nel tempo, indotta dall'evaporazione, nonché l'aumento del contenuto di acqua indotto dalla fase di imbibizione. Quando si trascura il ruolo della temperatura (modello H), si verifica una desaturazione più rapida del materiale durante la fase di evaporazione e un minor recupero del contenuto d'acqua durante la fase di imbibizione.

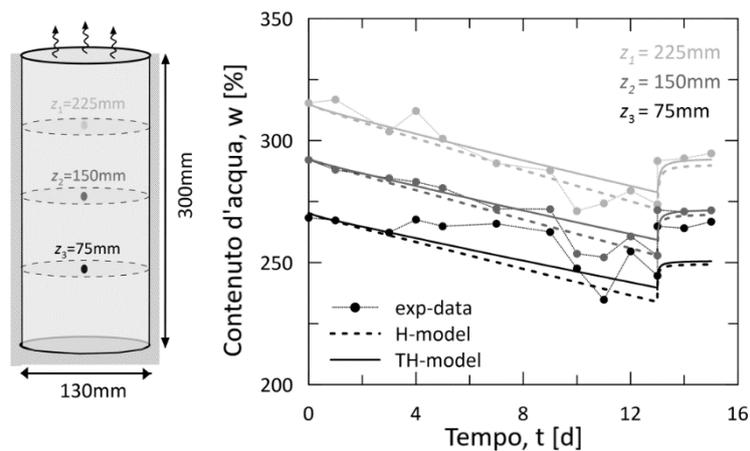


Fig 1. Confronto tra i risultati sperimentali e numerici dell'evoluzione temporale del contenuto d'acqua durante la prova di evaporazione/imbibizione

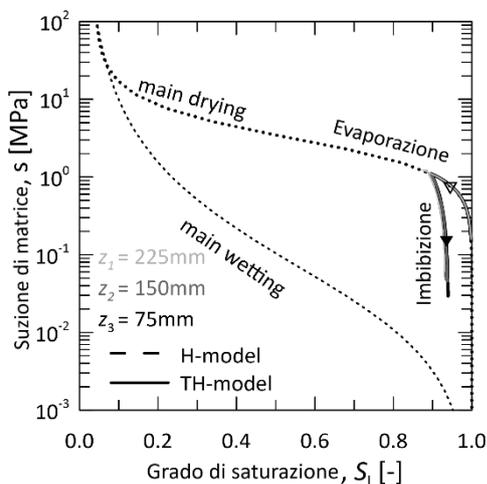


Fig 2. Percorso di evaporazione/imbibizione avvenuto durante la prova sperimentale nel piano suzione di matrice-grado di saturazione

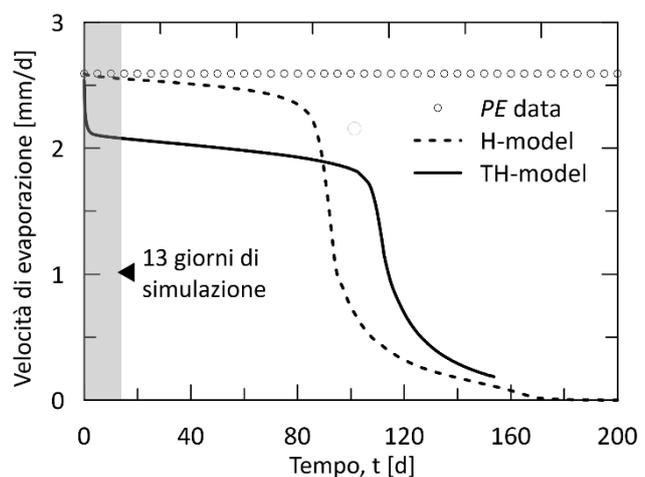


Fig 3. Previsione numerica dell'evoluzione temporale della velocità di evaporazione reale AE

Dopo 13 giorni di evaporazione, il grado di saturazione medio del provino è circa $S_1 = 0.9$ (Fig 2). Durante la fase di imbibizione, si verifica una riduzione della suzione di matrice e una contestuale saturazione del materiale. Durante questa fase, il materiale segue la curva di 'scanning' ($dS_1 = k_s \cdot ds$ con $k_s = 4 \times 10^{-5} \text{ kPa}^{-1}$) riportata in Fig 2 e non raggiunge mai la curva di 'main wetting'. Ciò implica un incremento del contenuto d'acqua, che però non riesce a tornare al suo valore iniziale: ciò può essere ascrivito al valore di pressione d'acqua alla base (non sufficiente per saturare il campione) ed al ritiro indotto dall'essiccazione, che implica, per un dato grado di saturazione, un contenuto d'acqua inferiore.

In Fig 3, invece, si mostra la previsione numerica del flusso evaporativo valutato al bordo superiore del provino. Le previsioni del modello TH sono influenzate dalla diminuzione della temperatura indotta dal processo di evaporazione. A sua volta, l'abbassamento della temperatura provoca un marcato calo dell'evaporazione nelle prime ore di simulazione. Un calo così marcato è coerente con i risultati dei test 1 e 3 in Song *et al.* (2014), e non è riprodotto dal modello H.

6. Conclusioni

Sono stati presentati alcuni dei risultati dello studio effettuato sugli effetti dei processi di evaporazione/imbibizione su una miscela cemento-bentonite. Nell'ambito dei diaframmi plastici, l'evaporazione potrebbe comprometterne la capacità sigillante nel caso si verificasse una significativa desaturazione del materiale. La desaturazione potrebbe infatti creare delle fratture per il ritiro o incrementare in maniera critica la permeabilità relativa della fase non bagnante. Aspetto quest'ultimo che risulta rilevante in presenza di contaminanti non acquosi meno densi dell'acqua. In alcuni casi potrebbe ritenersi necessario predisporre sistemi di copertura impermeabile al di sopra dei diaframmi di cemento-bentonite.

Bibliografia

- Bear J., Cheng A. H. D. (2010). Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport. Springer Science & Business Media, Netherlands.
- Cosenza P., Guérin R., Tabbagh A. (2003), "Relationship between thermal conductivity and water content of soils using numerical modelling". *European Journal of Soil Science*, 54(3), 581–588.
- Evans J. C., Ruffing D. G. (2017). "Design and construction of an experimental soil-bentonite cut-off wall". *Geotechnical Frontiers*, 164–174.
- Gens A. (2010). "Soil–environment interactions in geotechnical engineering". *Geotechnique*, 60, 3–74
- Gray D.M. (1970). Handbook on the principals of hydrology. Canadian National Committee for the International Hydrological Decade, National Research Council of Canada, Ottawa
- Kimball B.A., Jackson R.D., Reginato R.J., Nakayama F.S., Idso S.B. (1976). "Comparison of field-measured and calculated soil-heat fluxes". *Soil Science Society of America Proceedings*, 40(1), 18-25.
- Lai S. H., Tiedje J. M., Erickson A. E. (1976). "In situ measurement of gas diffusion coefficient in soils". *Soil Science Society of America Journal*, 40(1), 3–6.
- Malusis M. A., Yeom S., Evans J. C. (2011). "Hydraulic conductivity of model soil–bentonite back-fills subjected to wet–dry cycling". *Canadian Geotechnical Journal*, 48(8), 1198–1211
- Ralaizafisolariovony N., Tran K., Degré A., Mercatoris B., Léonard A., Toye D., Charlier, R. (2020), "Experimental and numerical investigation of the drying of an agricultural soil". 4th European Conference on Unsaturated Soils (E-UNSAT 2020), E3S Web of Conferences, vol. 195.
- Song W. K., Cui Y. J., Tang A. M., Ding W. Q., Tran T. D. (2014). "Experimental study on water evaporation from sand using environmental chamber". *Canadian Geotechnical Journal*, 51(2), 115–128.
- Tindall J. A., Kunkel J. R., Anderson D. E. (1998). Unsaturated Zone Hydrology for Scientists and Engineers. Prentice Hall, New Jersey.
- Trischitta P., Cosentini R. M., Della Vecchia G., Sanetti G., Musso G. (2020). "Preliminary investigation on the water retention behaviour of cement bentonite mixtures". 4th European Conference on Unsaturated Soils (E-UNSAT 2020), E3S Web of Conferences, vol. 195
- Van Bavel C., Hillel D. (1976). "Calculating potential and actual evaporation from a bare soil surface by simulation of concurrent flow of water and heat". *Agricultural Meteorology*, 17(6), 453–431 476.
- Van Genuchten M.T.T. (1980). "A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated Soils". *Soil Sci. Soc. Am. J.* 44, 892–898.
- Wu H. L., Jin F., Du Y. J. (2019). "Influence of wet-dry cycles on vertical cut-off walls made of reactive magnesia-slag-bentonite-soil mixtures". *Journal of Zhejiang University-SCIENCE A*, 20(12), 948–960.
- Zibisco, A. (2019). Messa in sicurezza permanente di siti contaminati da idrocarburi leggeri: studio del processo di desaturazione di miscele cemento-bentonite tramite tecnica ERT. PhD thesis, Politecnico di Torino.