

## 1. INTRODUCCIÓN

### 1.1. MOTIVACIONES Y OBJETIVOS

La modelación de los geomateriales para fines de ingeniería es un problema complejo en el cual intervienen un gran número de procesos. Además de ocurrir de manera simultánea en el mismo problema, estos procesos son en su mayoría acoplados, o sea, se influyen mutuamente. Por esta razón, las herramientas numéricas desarrolladas en la actualidad se basan en formulaciones acopladas que incorporan un creciente número de fenómenos que tienen lugar en el medio poroso.

Un ejemplo de esta realidad es la reciente utilización de las arcillas expansivas como elemento aislante en los sistemas de almacenamiento de residuos, sobre todo los radiactivos, lo que ha aumentado considerablemente el interés en el estudio de las interacciones físico-químicas que tienen lugar en las barreras de ingeniería sometidas a acciones térmicas, mecánicas, hidráulicas y químicas. Este creciente interés ha demandado la utilización de formulaciones matemáticas cada vez más cercanas al comportamiento real de estos materiales.

En este contexto, formulaciones acopladas termo-hidro-mecánicas (THM) propuestas en los últimos años (Gawin *et al.*, 1995; Navarro, 1997; Olivella *et al.*, 1994; Thomas & He, 1995) han sido ampliamente utilizadas como herramientas de diseño en el análisis geotécnico de barreras de arcilla compactada para fines de almacenamiento de residuos (ENRESA, 1999; Gens *et al.*, 1998; Navarro & Alonso, 2000). Estas formulaciones establecen como ecuaciones de gobierno del problema las ecuaciones de balance de masa, energía interna y momento lineal del medio poroso no saturado y sus ecuaciones constitutivas asociadas.

En el campo de la geoquímica, formulaciones de transporte reactivo inicialmente desarrolladas para problemas isotermos y en medios porosos saturados (ejemplos: Friendly & Rubin, 1992; Kirkner & Reeves, 1988; Yeh & Tripathi, 1989) han sido extendidas a condiciones no isotermas (Steeffel & Lasaga, 1994) o a medios porosos no saturados (Yeh & Tripathi, 1991). Estas y la mayoría de las más recientes formulaciones de transporte reactivo incorporan en la ecuación de transporte de las especies los principales mecanismos de transporte (advección, dispersión y difusión) y los más relevantes procesos geoquímicos que ocurren en la subsuperficie (reacciones del tipo ácido/base, oxidación/reducción, hidrólisis, disolución/precipitación de minerales, adsorción e intercambio de cationes).

En este momento, hay un creciente número de formulaciones que combinan de manera acoplada los problemas termo-hidráulico (TH) y de transporte reactivo (Cheng & Yeh, 1998; White, 1995; Xu *et al.*, 1999). También hay otras formulaciones que acoplan el problema de

transporte conservativo con formulaciones THM (como por ejemplo Schrefler, 1995; Thomas & Cleall, 1999).

En esta tesis se desarrolla por primera vez una formulación matemática que combina una formulación THM ya existente (Olivella *et al.*, 1994) con las ecuaciones de transporte reactivo de una manera totalmente acoplada. Aunque en el desarrollo de las ecuaciones de transporte y del modelo geoquímico se han considerados los fenómenos que tienen lugar en las barreras de arcilla frecuentemente utilizadas como elemento aislante en sistemas de almacenamiento de residuos radiactivos, se trata de una formulación general de aplicación extensible a otros campos de la ingeniería.

La influencia de variables ambientales (geoquímicas) en los comportamientos mecánico e hidráulico de los materiales arcillosos es un hecho ya reconocido en la Ingeniería Geotécnica. Por tanto, se ha querido considerar la influencia de las variables geoquímicas (problema de transporte reactivo) en el comportamiento THM del suelo, originando una formulación acoplada termo-hidro-mecánica y geoquímica (THMG). La figura 1.1 ilustra esta nueva formulación, donde las flechas en ambos sentidos indican que los problemas THM y de transporte reactivo se influyen mutuamente. En esta figura también se observa que el problema de transporte reactivo viene dado por tres elementos básicos: ecuaciones de transporte, modelo de equilibrio químico y modelo para las reacciones en cinética.

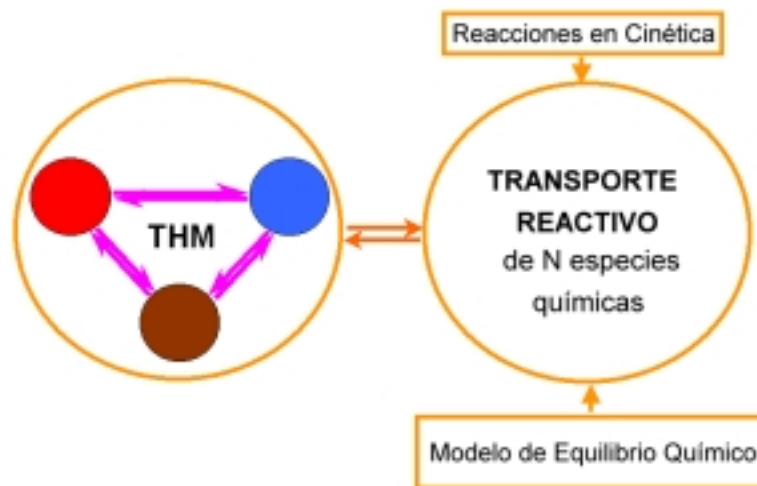


Figura 1.1. Problema acoplado termo-hidro-mecánico y geoquímico (THMG).

La influencia de las variables geoquímicas en el problema THM se llevó a cabo a través de un modelo constitutivo que considera la dependencia del comportamiento mecánico de las arcillas expansivas con la succión osmótica y las concentraciones de los cationes intercambiables. Se ha desarrollado este modelo dentro del marco general de un modelo elasto-plástico para materiales de doble estructura (Gens & Alonso, 1992). Este tipo de modelo es adecuado para la consideración de las variables geoquímicas pues sus efectos se

introducen en el comportamiento de la microestructura, que es donde se encuentran los minerales químicamente activos y donde ocurren las interacciones físico-químicas entre las partículas y el agua intersticial ionizada.

Este modelo constitutivo químico-mecánico constituye una de las posibles interacciones entre los problemas THM y de transporte reactivo. Los propios modelos para materiales de doble estructura ofrecen otras posibilidades de interacciones, como por ejemplo la consideración de diferentes propiedades hidráulicas para los dos niveles estructurales. Con esto, se podría establecer un interesante acoplamiento hidro-mecánico donde variables que intervienen en el problema de flujo también dependerían del comportamiento mecánico del material (macro y micro porosidades, por ejemplo).

En la figura 1.2 se presentan otros fenómenos que pueden tener lugar en el medio poroso cuando se estudia su comportamiento THMG de manera integrada. Por ejemplo, minerales precipitados pueden actuar como agentes cementantes cambiando la compresibilidad y resistencia del suelo, influyendo directamente en su comportamiento mecánico de manera diferente de la considerada en esta tesis. Considerando además que los minerales sólidos ocupan un determinado volumen en el medio poroso, cuando un mineral se disuelve, el volumen que ocupaba antes se incorporará al volumen de vacíos, aumentando la porosidad y posiblemente la permeabilidad del medio.

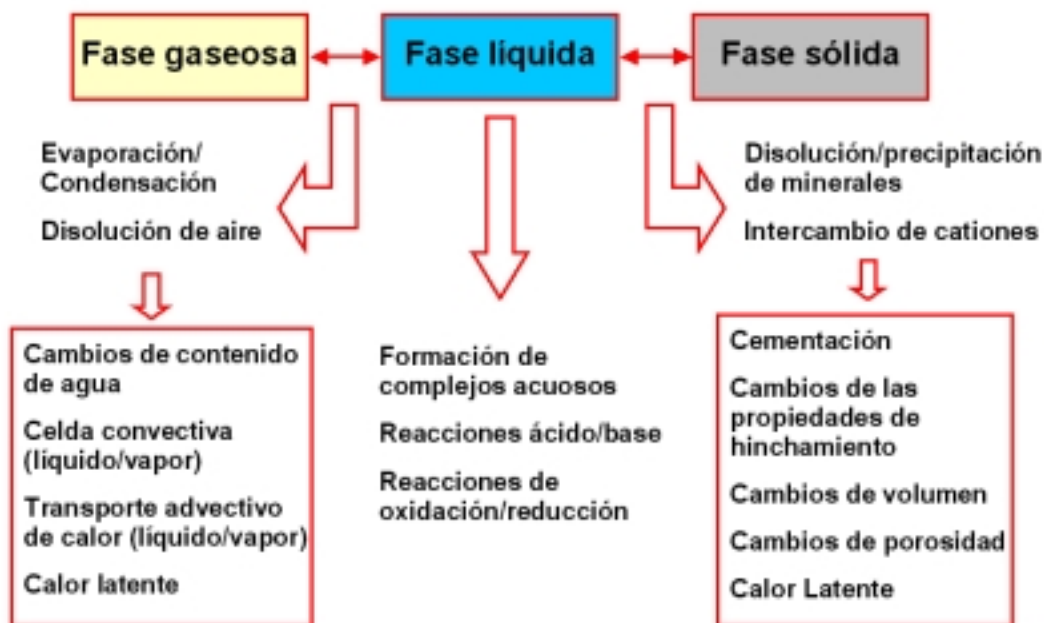


Figura 1.2. Ejemplos de acoplamientos que se pueden considerar en una formulación THMG.

Procesos acoplados como ósmosis-química, termo-ósmosis y ultrafiltración son ejemplos de interacciones THMG que pueden tener lugar en materiales de baja permeabilidad como las

arcillas. De hecho, Mitchell (1991) observa que en suelos arcillosos poco permeables (conductividad hidráulica menor que  $10^{-9}$  m/s) los flujos termo-osmótico y químico-osmótico de líquido y los flujos químicos difusivos empiezan a tener importancia frente a los flujos generados por gradiente hidráulico. Los procesos acoplados están intrínsecamente relacionados con las formulaciones THMG, que constituyen una base teórica adecuada para su tratamiento matemático y numérico en problemas de contorno.

Aunque la formulación que se presenta en esta tesis no considera *todos* los procesos y fenómenos mencionados anteriormente, se ha intentado dar un paso más en la comprensión del comportamiento de los materiales geotécnicos en aplicaciones donde interesa cuantificar la evolución de las variables geoquímicas y la influencia de estas variables en el comportamiento hidráulico y mecánico del suelo. Cabe resaltar que en los casos que se han analizado se ha intentado considerar en la formulación los procesos dominantes que tenían lugar en el medio poroso.

## 1.2. ORGANIZACIÓN Y CONTENIDO

La tesis se compone de dos partes: en primer lugar se presenta una nueva formulación para el problema de transporte reactivo en medio poroso no saturado y deformable. El desarrollo matemático, implementación numérica y aplicaciones de la formulación se presentan en los capítulos 2, 3 y 4, respectivamente. A continuación, se propone un modelo constitutivo químico-mecánico para arcillas expansivas que establece un fuerte acoplamiento entre los problemas THM y de transporte reactivo. Se presenta este modelo en el capítulo 5 y se realiza su validación en el capítulo 6. Finalmente, se presentan conclusiones y propuestas para futuras líneas de investigaciones en el capítulo 7.

En el capítulo 2, se propone una formulación de transporte reactivo donde varias especies disueltas en la fase líquida se transportan a través del medio poroso y reaccionan químicamente entre sí en la fase líquida (reacciones homogéneas) o con otras especies en la fase sólida (reacciones heterogéneas). Las reacciones homogéneas pueden ser del tipo ácido/base, redox o de formación de complejos acuosos. Las reacciones heterogéneas son las reacciones de intercambio de cationes y de precipitación/disolución de minerales. Para todas se admite la hipótesis de equilibrio local. Para las reacciones de disolución/precipitación de minerales también se admite la cinética (reacciones lentas respecto a los tiempos característicos de transporte). Los mecanismos de transporte considerados para las especies en la fase líquida son difusión molecular, dispersión mecánica y advección.

El desarrollo de las ecuaciones de transporte reactivo sigue el procedimiento general propuesto por, entre otros, Lichtner (1985). A partir de las ecuaciones de balance de masa de cada una de las especies presentes en el medio, se obtiene el conjunto de ecuaciones de

transporte independientes utilizando las restricciones provenientes de las reacciones químicas reversibles (equilibrio local). Para ello, se divide el conjunto de las especies presentes en el medio en primarias y secundarias.

En la formulación propuesta, el número de incógnitas del problema de transporte reactivo no depende localmente del número de minerales precipitados, siendo el mismo para todo el dominio. Para ello, se utilizan como incógnitas de las ecuaciones de transporte las concentraciones totales (que incluyen las concentraciones de los minerales precipitados en equilibrio local), lo que permite resolver el equilibrio químico a través de algoritmos basados en la directa minimización de la Energía Libre de Gibbs. En esta formulación, es posible resolver las ecuaciones del problema de equilibrio químico (algebraicas) separadamente de las ecuaciones de transporte (en derivadas parciales).

El capítulo 3 trata de la implementación numérica de la formulación en el programa de elementos finitos CODE\_BRIGHT (Olivella *et al.*, 1995), que utiliza el Método de Newton-Raphson para resolver el sistema no lineal resultante de la discretización de las ecuaciones de transporte reactivo. Para ello, se deduce la matriz tangente que origina una formulación denominada Mixta, ya que comparte algunas características con las dos familias de enfoques existentes para la resolución numérica del problema de transporte reactivo (enfoque de sustitución directa y enfoque de iteraciones sucesivas). También se discuten los criterios de estabilidad de la ecuación de transporte reactivo y los esquemas numéricos de acoplamiento entre los problemas THM y de transporte reactivo (acoplamientos fuerte y débil). Finalmente, se discute la implementación numérica del subproblema de equilibrio químico propuesto, basado en la directa minimización de la energía libre de Gibbs, enmarcándose las diferencias más relevantes entre este tipo de algoritmo y los basados en las leyes de acción de masas.

En el capítulo 4 se presentan aplicaciones del módulo de transporte reactivo del CODE\_BRIGHT.

La principal aplicación para la cual la herramienta numérica ha sido desarrollada es el estudio del campo próximo para el almacenamiento de residuos radiactivos. Relacionado con este tipo de problema, se ha realizado un ejercicio de calibración en ensayos de celdas termohidráulicas (calentamiento e hidratación de una bentonita) que permitió la determinación de parámetros geoquímicos (coeficientes de selectividad) y de transporte (coeficiente de difusión molecular) para el material en consistencia con la formulación propuesta. Se presentan los resultados de la modelación THM y de transporte reactivo en la celda de caletador plano CT18 (Cuevas *et al.*, 1996; FEBEX, 1997a).

Iniciando una nueva línea de investigación relacionada con la ingeniería de petróleo, se estudia el problema de deposición masiva de minerales en las inmediaciones del pozo de producción cuando se estimula la producción de petróleo inyectando en el yacimiento un tipo de agua (generalmente agua del mar) químicamente incompatible con el agua original de la

formación. En esta aplicación se ha utilizado un modelo geoquímico (Yuan & Todd, 1991) basado en la familia de los modelos de Pitzer para salmueras.

En el capítulo 5 se presenta un modelo constitutivo elastoplástico que relaciona las variables geoquímicas con el comportamiento mecánico de las arcillas expansivas. El modelo tiene en cuenta explícitamente el proceso de intercambio de cationes. Las variables geoquímicas elegidas en la modelación son las fracciones equivalentes de los cationes intercambiables y la succión osmótica.

Este modelo se formuló dentro del marco general propuesto por Gens & Alonso (1992) para el comportamiento mecánico de las arcillas expansivas no saturadas, que tiene como principal característica la distinción de dos niveles estructurales para un suelo expansivo: un nivel macroestructural y otro microestructural. La microestructura es elástica y se comporta de manera independiente de la macroestructura. La macroestructura tiene su comportamiento análogo a los materiales granulares. En ella actúan los fenómenos capilares. Hinchamiento y retracción de la microestructura pueden inducir deformaciones plásticas macroestructurales, estableciendo un acoplamiento entre los dos niveles, que es otro de los puntos clave del modelo.

El objetivo del capítulo 6 es la validación del modelo constitutivo químico-mecánico propuesto en el capítulo 5, denominado BExCM. Para ello, se intentará reproducir cualitativamente algunos ensayos en celdas de compresión isotropa y edométricos (de hinchamiento y presión de hinchamiento) en suelos expansivos cuyo comportamiento mecánico se presenta marcadamente afectado por acciones químicas. La intención es captar los principales fenómenos relacionados con el comportamiento de estos suelos sometidos a la exposición a soluciones salinas de diferentes concentraciones y con diferentes tipos de sales disueltas.

Por último, en el capítulo 7 se presentan las conclusiones de la tesis y se proponen futuras líneas de investigación que darán continuidad al trabajo aquí iniciado.