

7. CONCLUSIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

7.1. CONCLUSIONES

En esta tesis se ha avanzado 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. Se ha llevado a cabo este objetivo a través de una formulación acoplada termo-hidro-mecánica y geoquímica (THMG) donde se ha implementado una nueva formulación para el problema de transporte reactivo de manera totalmente acoplada a una formulación THM ya existente (Olivella *et al.*, 1994). En esta nueva formulación THMG, variables geoquímicas influyen en el comportamiento THM del suelo por medio de un modelo constitutivo mecánico para suelos expansivos y químicamente activos basado en un marco general de materiales de doble estructura (Gens & Alonso, 1992). Se han implementado la formulación de transporte reactivo y el modelo constitutivo químico-mecánico en el programa de elementos finitos CODE_BRIGHT (Olivella *et al.*, 1995).

En la formulación de transporte reactivo propuesta, se obtiene a partir de las ecuaciones de balance de masa de cada una de las especies presentes en el medio el conjunto de ecuaciones de transporte independientes utilizando las restricciones provenientes de las reacciones químicas reversibles (equilibrio local). El modelo geoquímico considera las reacciones del tipo ácido/base, redox, formación de complejos acuosos, intercambio de cationes y 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. Los mecanismos de transporte considerados para las especies en la fase líquida son difusión molecular, dispersión mecánica y advección.

En la formulación, 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 han utilizado 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 minimización directa de la Energía Libre de Gibbs. Se resuelven además las ecuaciones del problema de equilibrio químico (algebraicas) separadamente de las ecuaciones de transporte (en derivadas parciales).

Estas características posibilitan una eficiente implementación de la formulación en programas de elementos finitos que utilizan 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 Mixta*, que tiene algunas características en común 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). Desde el punto de vista de comportamiento numérico, se cree que el hecho de resolver simultáneamente las ecuaciones de transporte por Newton-Raphson hace que la formulación propuesta se identifique mucho más con el enfoque de sustitución directa. También se proponen esquemas numéricos de acoplamiento entre los problemas THM y de transporte reactivo (acoplamientos fuerte y débil).

Se ha realizado un ejercicio de calibración de la formulación de transporte reactivo 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 presentó los resultados en la celda de calentador plano CT18 (Cuevas *et. al.*, 1996; FEBEX, 1997a). Resultados numéricos y mediciones experimentales coinciden satisfactoriamente para la mayoría de las variables THM y geoquímicas y la modelación es cualitativamente consistente con observaciones al microscopio realizadas en los ensayos de celdas y relacionadas con la precipitación de minerales en la zona caliente de la muestra. Pero hay algunos puntos de la modelación geoquímica que deben ser mejorados, como el comportamiento de la fracción arcillosa a temperaturas superiores a los 70°C.

Iniciando una nueva línea de investigación relacionada con la ingeniería de petróleo, se estudió 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. Se ha implementado un modelo geoquímico para salmueras (Yuan & Todd, 1991) en CODE_BRIGHT, donde los minerales pueden precipitar tanto por la mezcla de aguas químicamente incompatibles como por los cambios de temperatura y presión de las aguas inyectada y producida en los pozos (autosedimentación). Se realizó una simulación numérica del mecanismo de formación de zonas de daño en el yacimiento debido a la mezcla de aguas químicamente incompatibles. Esta simulación numérica también fue capaz de prever la formación de incrustaciones en el sistema de extracción de petróleo (pozo de producción). Con esto, se demostró la utilidad de CODE_BRIGHT como herramienta de diseño en la prevención de los problemas causados por este fenómeno.

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.

En este modelo constitutivo, la microestructura es elástica no lineal y se comporta de manera independiente de la macroestructura. La macroestructura tiene un 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.

Se ha llevado a cabo un ejercicio de validación del modelo donde se han reproducido cualitativamente algunos ensayos en celdas de compresión isótropa y edométricas (de hinchamiento y presión de hinchamiento) en suelos expansivos cuyo comportamiento mecánico se muestra marcadamente afectado por acciones químicas. Simulaciones numéricas a nivel de puntos de integración y también como problemas de contorno de varios ensayos encontrados en la literatura (Daupley, 1997; Di Maio, 1996; Santamarina & Fam, 1995) han demostrado que el modelo ha sido capaz de explicar muchos de los fenómenos relacionados con el comportamiento de suelos sometidos a la exposición a soluciones salinas de diferentes concentraciones y con diferentes tipos de sales disueltas. Se discuten algunas limitaciones del modelo para los ensayos donde se expone el suelo a ciclos de diferentes soluciones salinas y agua. La razón parece estar en la irreversibilidad de las reacciones de intercambio de cationes bajo la aplicación de carga mecánica, concepto compatible con la hipótesis de deformaciones microestructurales reversibles. Pero, se necesita más evidencia experimental que avale esta conclusión, sobre todo en relación con la determinación de los cationes en el complejo de cambio de la arcilla sometida a acciones químicas bajo diferentes estados de tensiones.

7.2. FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Esta tesis está en la interfaz de distintos campos de las Ciencias de Tierra, como las ingenierías geotécnica y de petróleo y la hidrogeología. Esto significa que la herramienta numérica desarrollada aquí tiene realmente un gran número de aplicaciones potenciales. Restringiendo el dominio de todas las posibles aplicaciones, se divide las futuras líneas de investigación en dos grupos: aplicaciones inmediatas y futuros desarrollos.

Las aplicaciones del modelo presentadas en los capítulos 4 y 6 han dejado abiertos algunos puntos y líneas de investigación que se pueden estudiar sin la necesidad de nuevos desarrollos en la formulación. A continuación se presentan ejemplos de líneas de investigación de aplicación inmediata:

- *Ensayos en celdas termohidráulicas*: CIEMAT a realizado una serie de otros ensayos en celdas termohidráulicas semejantes a la celda CT18 presentada en el capítulo 4. Por limitaciones de tiempo no se han podido reproducir estos ensayos con CODE_BRIGHT. En algunos de los ensayos, ha sido posible extraer agua intersticial en la zona cerca del calentador, ya que se ha permitido un tiempo de hidratación más largo que para las celdas CT18 y CT17. Esta información puede ser muy valiosa pues el comportamiento geoquímico de la fracción arcillosa a temperaturas superiores a los 70°C parece no estar totalmente aclarado para el modelo de transporte reactivo. La aplicación del modelo a ensayos a gran escala ("Mock-up" e "In situ") es otra área inmediata de trabajo.
- *Formación de zonas de daño y incrustaciones*: esta aplicación de la ingeniería de petróleo apenas se ha iniciado. Mucho queda por hacer. Pero para empezar, uno de los próximos pasos en esta nueva línea de investigación es el estudio de otros tipos de incrustaciones, como los minerales carbonatados (Atkinson & Mecik, 1997), aumentando el campo de aplicación de CODE_BRIGHT a estos tipos de problemas. Será importante también investigar otras maneras de considerar a heterogeneidad del yacimiento, como por ejemplo, tratando la formación como un medio fracturado. Efectos de temperatura y presión tampoco han sido considerados en la aplicación del capítulo 4.
- *Modelo constitutivo químico-mecánico*: se ha considerado la validación cualitativa del modelo constitutivo químico-mecánico (capítulo 6) satisfactoria, pero hay que seguir adelante en dos frentes: primero se debe partir para la modelación cualitativa a partir de un programa experimental coherente con el modelo. El otro frente está relacionado con el estudio del comportamiento irreversible microestructural que de momento se atribuye a cierta irreversibilidad de las reacciones de intercambio bajo diferentes estados de tensiones.

La modelación cualitativa de ensayos químico-mecánicos requiere una nueva línea de investigación experimental donde la caracterización geoquímica del material (fases líquida y sólida) debe ser la más completa posible (incluyendo la determinación de los cationes intercambiables en el complejo de cambio de la arcilla).

Poco se conoce sobre los efectos químicos en el comportamiento mecánico de los suelos compactados utilizados en los almacenamientos de residuos radiactivos. A los que tienen interés en seguir esta línea de investigación, una recomendación: en estos tipos de almacenamientos la salinidad del agua de los poros puede superar la salinidad del agua intersticial inicialmente en la barrera y la salinidad del agua de hidratación (inyectada o de la roca alojante) debido a la evaporación del agua cerca del calentador.

En la figura 7.1(a), extraída de la aplicación de la celda termohidráulica CT18 presentada en la sección 4.2 del capítulo 4, se observa como el grado de saturación disminuye en un punto cercano al calentado debido a la evaporación de agua y posteriormente aumenta debido a la llegada del frente de hidratación. Esta evaporación resulta en un aumento de la fuerza iónica del agua de los poros en esta zona de la muestra (figura 7.1(b)). Esto significa que al

secado de la microestructura debido al aumento de la succión matricial (evaporación) se añade el secado microestructural debido al aumento de succión osmótica (aumento de la salinidad del agua). En Sánchez *et al.* (2001), con base en la observación de un evento de sobrecalentamiento en un ensayo a gran escala ("Mock-up") y a través del modelo constitutivo BExM, se ilustra en detalles como un secado intenso de la microestructura puede afectar de manera irreversible a variables claves en este problema como es la presión de hinchamiento desarrollada en la barrera.

La disminución de salinidad observada en la figura 7.1(b) depende básicamente de dos factores: la velocidad de la llegada del frente de hidratación y la capacidad del material en transportar los iones por difusión molecular. Los puntos 1, 2 y 3 en la figura 7.1 ilustran bien este concepto. El aumento del grado de saturación (figura 7.1(a)) sólo depende de la llegada del frente de hidratación, que es lenta dada la baja permeabilidad de la bentonita. En la figura 7.1(b), la rápida disminución de la fuerza iónica entre los puntos 1 y 2 se atribuye a la tendencia a la uniformización de las concentraciones en la muestra dada por la por difusión molecular, indicando el predominio de este mecanismo de transporte de iones sobre la dilución resultante de la llegada del frente de hidratación.

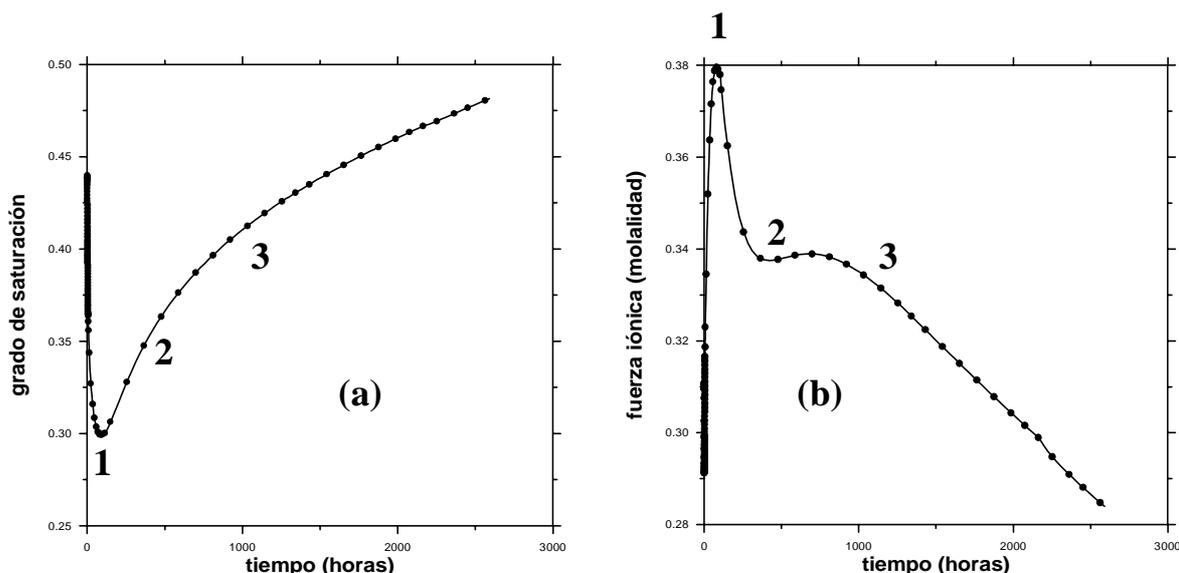


Figura 7.1. Punto cerca del calentador en la modelación de la celda CT18 (capítulo 4).

(a) Evolución del grado de saturación.

(b) Evolución de la fuerza iónica.

Estos resultados indican que los programas experimentales de ensayos químico-mecánicos deben tener en cuenta soluciones salinas *concentradas* cuando se trata de almacenamiento de residuos en condiciones no isotermas (con evaporación de agua).

El otro grupo de futuras líneas de investigación son aquellas relacionadas con nuevos desarrollos de la formulación considerando otros fenómenos que pueden tener lugar en el medio poroso cuando se estudia su comportamiento THMG de manera integrada.

Un ejemplo son las aplicaciones a la ingeniería de petróleo relacionadas con la perforación de pozos en lutitas donde se tiene en cuenta el flujo osmótico de líquido como elemento que influye en la estabilidad mecánica del pozo recién perforado. Frydman & Fontoura (2001) demuestran numéricamente como el flujo osmótico originado de la diferencia de concentraciones salinas entre el agua utilizada en la perforación y el agua de los poros de la roca contribuye para acelerar la disipación de presión de poros generada inicialmente en el proceso de perforación. Este mecanismo adicional de disipación de presión de poros contribuirá a la estabilización mecánica del pozo (Frydman & Fontoura, 2001; Molenaar & Huyghe, 2001).

Además, como se ha intentado ilustrar en el problema de estimulación de la producción de petróleo por inyección de agua, presentado en la sección 4.3 del capítulo 4, interacciones geoquímicas entre el agua inyectada en el pozo y la formación como la disolución/precipitación de minerales o intercambio de cationes pueden cambiar las propiedades mecánicas e hidráulicas de la formación.

Por tanto, ejemplos de futuros desarrollos de la formulación THMG presentadas en esta tesis son:

- Minerales precipitados pueden actuar como agentes cementantes cambiando la compresibilidad y resistencia del suelo, influyendo directamente en su comportamiento mecánico. Las concentraciones de los minerales precipitados vienen dadas por el problema de transporte reactivo y, como sería de esperar, el contenido, resistencia y compresibilidad de estos posibles agentes cementantes serían variables químico-mecánicas básicas en un modelo para suelos cementados.

En materiales como las lutitas, la fracción arcillosa puede ser químicamente activa y el modelo constitutivo desarrollado en el capítulo 5 puede ser útil para explicar parte de su comportamiento mecánico. Pero también se trata de un material cementado, que necesita nuevos desarrollos en el BExCM que incluyan los efectos de los minerales cementantes.

- 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. Exclusión aniónica y difusión molecular dependiente de la especie acuosa están relacionados los estos procesos acoplados y son de gran interés en el estudio del almacenamiento de residuos. 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.