

**CONTAMINACIÓN DE SUELOS CON HIDROCARBUROS Y MODELOS  
THM**

**SANDRA MILENA CALDERÓN GÓMEZ**



**UNIVERSIDAD DE LOS ANDES  
FACULTAD DE INGENIERÍA  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA CIVIL Y AMBIENTAL  
BOGOTÁ  
2006**

**CONTAMINACIÓN DE SUELOS CON HIDROCARBUROS Y MODELOS  
THM**

**SANDRA MILENA CALDERÓN GÓMEZ**

**Proyecto de Grado para optar al título de Magíster en Ingeniería Civil**

**Asesor  
ARCESIO LIZCANO PELÁEZ, Ph.D.  
Profesor Asociado**



**UNIVERSIDAD DE LOS ANDES  
FACULTAD DE INGENIERÍA  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA CIVIL Y AMBIENTAL  
BOGOTÁ  
2006**



## AGRADECIMIENTOS

“Por su inspiración y enseñanzas cuya esencia es este libro, doy las gracias a todos y cada uno de mis maestros, y se los ofrezco a todos.”

**Sogyal Rimpoché**

A mis mejores maestros, mis padres, por su apoyo y confianza incondicional la cual espero no haber defraudado, y a mi hermana por alegrarme la vida.

A Manuel, por su comprensión, dedicación y por estar siempre conmigo apoyándome. A mis amigos, por todos los momentos divertidos y por haber compartido conmigo estos años. A los ingenieros Arcesio Lizcano y José Ignacio Rengifo por su apoyo, consideración y comprensión en quizá, el momento más difícil de mi vida; además, a todas las personas que también contribuyeron a mi formación personal y académica.

A todas estas personas, GRACIAS y a Dios por haberlos puesto en mi camino y permitirles dejar una huella en mi vida.



## CONTENIDO

AGRADECIMIENTOS.....	I
CONTENIDO.....	II
ÍNDICE DE FIGURAS .....	V
ÍNDICE DE TABLAS .....	VI
INTRODUCCIÓN.....	VIII
<b>1. CONTAMINACIÓN DEL SUELO.....</b>	<b>1</b>
1.1 INTRODUCCIÓN.....	1
1.2 TRANSFORMACIÓN Y TRANSPORTE DE SUSTANCIAS.....	1
1.2.1 <i>Mecanismos de Transporte</i> .....	3
1.2.1.1 Lixiviación .....	3
1.2.1.2 Advección .....	4
1.2.1.3 Difusión .....	4
1.2.1.4 Dispersión.....	5
1.2.2 <i>Mecanismos de Transformación</i> .....	7
1.2.2.1 Degradación .....	7
1.2.2.2 Volatilización.....	7
1.2.2.3 Adsorción.....	8
1.3 NATURALEZA QUÍMICA DEL PETRÓLEO.....	9
1.3.1 <i>Hidrocarburos</i> .....	9
1.3.1.1 Alcanos .....	10
1.3.1.2 Aromáticos.....	10
1.4 HIDROCARBUROS DEL PETRÓLEO EN EL SUELO.....	11
1.4.1 <i>Parámetros del Contaminante</i> .....	11
1.4.1.1 Solubilidad en agua.....	11
1.4.1.2 Presión de vapor .....	12
1.4.1.3 Polaridad .....	12
1.4.2 <i>Parámetros del Suelo</i> .....	12
1.4.2.1 Materia orgánica .....	12
1.4.2.2 Contenido de agua .....	13
1.4.2.3 Textura del suelo.....	14
1.4.2.4 Estructura del suelo.....	14
1.4.2.5 Profundidad del nivel freático .....	14
1.4.3 <i>Parámetros Ambientales</i> .....	14
1.4.3.1 Temperatura.....	14
1.4.3.2 Precipitación .....	14
1.4.3.3 Evapotranspiración .....	15



1.4.4	<i>Transporte y Transformación de los Hidrocarburos</i> .....	15
1.4.4.1	Dispersión.....	15
1.4.4.2	Evaporación .....	15
1.4.4.3	Disolución.....	15
1.4.4.4	Fotooxidación .....	16
1.4.4.5	Transformación microbiana.....	16
1.5	CONTAMINACIÓN DEL SUELO CON HIDROCARBUROS EN COLOMBIA.....	16
1.5.1	<i>Impacto de los Derrames de Petróleo</i> .....	16
1.5.1.1	Áreas afectadas .....	18
1.5.1.2	Impacto socioeconómico .....	19
1.5.2	<i>Legislación Ambiental del Recurso Suelo</i> .....	20
1.5.2.1	Resolución 1170 de 1997.....	20
1.6	MÉTODOS DE REMEDIACIÓN.....	22
<b>2.</b>	<b>REMEDIACIÓN DE UN SUELO CONTAMINADO CON GASOLINA.....</b>	<b>25</b>
2.1	INTRODUCCIÓN.....	25
2.2	CASO DE ESTUDIO .....	25
2.3	CARACTERIZACIÓN DEL SUELO .....	26
2.3.1	<i>Datos y Resultados</i> .....	26
2.3.1.1	Humedad natural.....	26
2.3.1.2	Limites .....	27
2.3.1.3	Contenido de materia orgánica .....	28
2.3.1.4	Gravedad específica.....	28
2.3.1.5	Análisis granulométrico.....	29
2.3.1.6	Permeabilidad .....	32
2.3.2	<i>Clasificación del Suelo</i> .....	33
2.4	CARACTERIZACIÓN DEL CONTAMINANTE.....	35
2.4.1	<i>Datos y Resultados</i> .....	35
2.4.2	<i>Clasificación del Contaminante</i> .....	36
2.5	MODELO DE REMEDIACIÓN.....	36
2.5.1	<i>Método de Remediación</i> .....	36
2.5.1.1	Sistema de EVS .....	36
2.5.1.2	Modelo del sistema de EVS.....	38
2.5.1.3	Resultados.....	40
<b>3.</b>	<b>MODELOS THM.....</b>	<b>43</b>
3.1	INTRODUCCIÓN.....	43
3.2	MARCO TEÓRICO.....	43
3.2.1	<i>Ecuaciones Constitutivas</i> .....	43
3.2.1.1	Modelo termo-hidráulico .....	45
3.2.1.2	Modelo hidro-mecánico.....	46
3.3	EJEMPLOS.....	50
3.3.1	<i>Arena Densa</i> .....	50
3.3.1.1	Caso de estudio.....	51
3.3.1.2	Resultados.....	59
3.3.2	<i>Roca Agrietada</i> .....	60
3.3.2.1	Caso de estudio.....	60



---

3.3.2.2	Resultados.....	64
3.3.3	<i>Polvo de Arcilla</i> .....	65
3.3.3.1	Caso de estudio.....	65
3.3.3.2	Resultados.....	68
3.4	CARACTERÍSTICAS GENERALES.....	68
<b>4.</b>	<b>CONCLUSIONES</b> .....	<b>70</b>
	<b>BIBLIOGRAFÍA</b> .....	<b>XI</b>



## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Diversos Procesos que Ocurren en la Zona No Saturada.....	2
Figura 2. Clasificación General de los Hidrocarburos.....	10
Figura 3. Muestra del Suelo en Estudio.....	26
Figura 4. Determinación del Límite Líquido del Suelo en Estudio.....	27
Figura 5. Determinación de la Granulometría del Suelo en Estudio.....	31
Figura 6. Carta de Plasticidad.....	34
Figura 7. Cromatograma de la Muestra Inicial del Suelo en Estudio.....	35
Figura 8. Diagrama Esquemático del <i>Soil Vapor Extration</i> .....	37
Figura 9. Equipo de Simulación de la Remediación de un Acuífero en 2D.....	38
Figura 10. Cromatograma de la Muestra Final del Suelo en Estudio.....	40
Figura 11. Comparación de los Cromatogramas Inicial y Final.....	42
Figura 12. Foto de la Celda Triaxial (Esfuerzo, Succión y Temperatura).....	66



## ÍNDICE DETABLAS

Tabla 1. Procesos de Transformación y Transporte.....	3
Tabla 2. Parámetros de Contaminante, Suelo y Ambiente que Influyen en el Transporte a Través del Suelo.....	11
Tabla 3. Información Atentados Oleoducto Caño Limón – Coveñas.....	18
Tabla 4. Ubicación de las Zonas Afectadas por Derrames de Petróleo del País. ....	19
Tabla 5. Costo Económico por Atentados al Oleoducto Caño Limón-Coveñas. ....	19
Tabla 6. Límites de Limpieza para Suelos Expuestos a Hidrocarburos.....	22
Tabla 7. Métodos de Remediación de Suelo y Agua Subterránea.....	22
Tabla 8. Resumen Comparativo de las Tecnologías de Remediación.....	23
Tabla 9. Rangos Típicos de Tiempo y Costo para las Tecnologías de Remediación. ....	24
Tabla 10. Determinación de la Humedad Natural del Suelo en Estudio. ....	26
Tabla 11. Determinación del Límite Líquido del Suelo en Estudio. ....	27
Tabla 12. Determinación del Límite Plástico del Suelo en Estudio. ....	28
Tabla 13. Determinación del Índice Plástico del Suelo en Estudio.....	28
Tabla 14. Determinación del Contenido de Materia Orgánica del Suelo en Estudio.....	28
Tabla 15. Determinación de la Gravedad Específica del Suelo en Estudio.....	29
Tabla 16. Determinación de la Granulometría de la Muestra 1 del Suelo en Estudio.....	30
Tabla 17. Determinación de la Granulometría de la Muestra 2 del Suelo en Estudio.....	31
Tabla 18. Determinación del Porcentaje de Arcilla del Suelo en Estudio.....	32
Tabla 19. Determinación del Porcentaje Retenido en el Tamiz No. 200 del Suelo en Estudio.....	32
Tabla 20. Determinación de la Densidad del Suelo en Estudio.....	33
Tabla 21. Determinación de la Permeabilidad del Suelo en Estudio.....	33
Tabla 22. Compuestos Presentes en la Muestra Inicial del Suelo en Estudio. ....	35
Tabla 23. Comparación entre las Concentraciones Permitidas y las Encontradas en la Muestra Inicial. ....	36





Tabla 24. Determinación del Peso del Suelo en Estudio.....	39
Tabla 25. Determinación de la Permeabilidad del Suelo en Estudio en el Modelo.....	39
Tabla 26. Compuestos Presentes en la Muestra Final del Suelo en Estudio. ....	40
Tabla 27. Comparación entre las Concentraciones Permitidas y las Encontradas en la Muestra Final.....	41
Tabla 28. Porcentaje de Descontaminación del Suelo en Estudio.....	41



## INTRODUCCIÓN

En el proyecto de grado “Remediación de Suelos Contaminados con Hidrocarburos”, se estudió el fenómeno de la contaminación en los suelos, por medio de la recopilación de información de los libros, artículos, publicaciones y páginas de internet consultados durante el transcurso del proyecto. Este tenía como objetivo principal la elaboración de un compendio de diferentes literaturas sobre el saneamiento de los suelos y lo que se ha venido haciendo en el mundo al respecto, con el fin de que éste sirviera como un punto de partida para las personas interesadas en el estudio de la remediación de los suelos contaminados con hidrocarburos.

En el proyecto de grado “Descontaminación de Suelos por el Método *Soil Vapor Extraction*”, se puso en práctica los conceptos adquiridos en el primer estudio, por medio de la modelación física (actividad que permite evaluar las diversas suposiciones a ser usadas en el diseño del sistema de remediación) de un caso particular de contaminación de un suelo de la ciudad de Bogotá y una posible técnica de remediación a ser utilizada. Este tenía como objetivo principal el análisis de la implementación de un proyecto de remediación seguro y exitoso, el cual requiere un conocimiento previo de la teoría y una investigación detallada del sitio, para de esta manera conocer sus características físicas químicas y biológicas.

Esta Tesis tiene como objetivo conocer los efectos de la temperatura e hidratación o secado en el comportamiento hidráulico y mecánico del suelo utilizado en altas temperaturas como barrera para el almacenamiento de desechos radioactivos en formaciones geológicas profundas y realizar una recopilación de los aspectos más importantes del trabajo realizado en los dos proyectos de grado anteriormente nombrados ya que la información se complementa y corrige dando como resultado una investigación más completa.

El proyecto se encuentra dividido en tres partes. La primera parte contiene información general sobre la contaminación de los suelos, específicamente los mecanismos de transporte y transformación de los contaminantes, el problema de la contaminación del suelo en Colombia y los métodos de remediación más utilizados. Posteriormente se encuentra la caracterización del caso práctico (suelo y contaminante) y el modelo de remediación utilizado, buscando que tan eficiente es tratando una arcilla contaminada con gasolina. Finalmente se encuentran los aspectos Termo-Hidro-Mecánicos asociados al comportamiento de los cambios de volumen y contenido de agua en los suelos.



## 1. CONTAMINACIÓN DEL SUELO

### 1.1 INTRODUCCIÓN

La disposición deliberada de desechos industriales ha sido una práctica común durante mucho tiempo; sin embargo la contaminación del agua subterránea y del suelo fue reconocida como un problema ambiental no hace más de 30 años.

La contaminación del suelo se puede originar esencialmente por operaciones industriales, actividades agrícolas, domésticas y urbanas, produciendo efectos nocivos sobre ecosistemas naturales, comprometiendo de esta manera la salud humana.

La industria petrolera en su conjunto ha tenido un gran impacto negativo en materia ambiental. El petróleo es un combustible importante en la sociedad contemporánea por que es la fuente de energía principal y más predominante; las instalaciones de ésta infraestructura poseen riesgos inherentes de fugas de petróleo, diesel y gasolina por roturas de tanques y ductos. Por esto, la importancia del conocimiento de los mecanismos de transporte y transformación de los contaminantes, los parámetros involucrados en la contaminación del suelo con hidrocarburos y los métodos de remediación existentes.

El presente capítulo está basado en la recopilación realizada previamente, la cual se encuentra en el documento “Remediación de Suelos Contaminados con Hidrocarburos”, si desea profundizar en el tema refiérase a éste.

### 1.2 TRANSFORMACIÓN Y TRANSPORTE DE SUSTANCIAS

De acuerdo con Tindall et al. (1999), numerosos problemas de gerencia ambiental involucran el transporte y reacciones de productos químicos disueltos, los cuales, son nativos del suelo, agregados deliberadamente, o derramados accidentalmente.

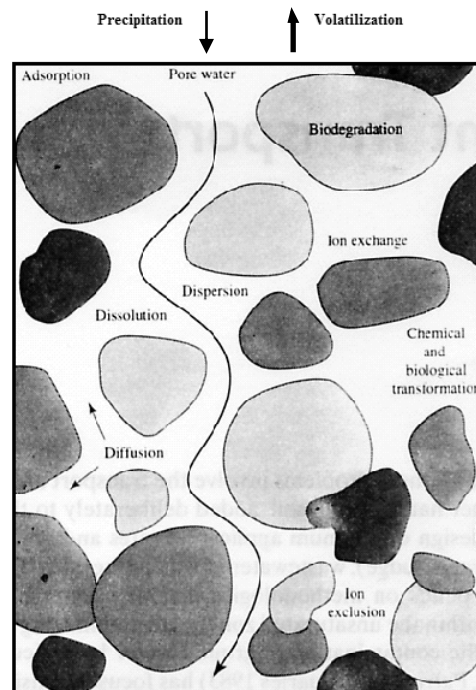
El diseño de tasas óptimas de aplicación y regulación del uso de fertilizantes, desechos domésticos (lodos de aguas residuales), irrigación de aguas residuales, herbicidas, y desechos radioactivos (disposición) depende de la implementación de metodologías que maximicen la degradación o retención de estos productos químicos dentro de la zona no saturada, mientras que se reduce al mínimo su movilidad.

La acumulación de masa en un volumen de control es siempre igual a las entradas de masa, menos las salidas de masa, más o menos las reacciones que ocurren en el volumen del control.

$$\text{Acumulación} = \frac{\text{Entradas} - \text{Salidas}}{\text{Transporte}} \pm \text{Re acciones} \quad (1)$$

Donde los primeros dos términos se cuantifican como términos de transporte, principalmente advección (flujo) y/o difusión/dispersión (mezcla) y el último como uno de transformación (Reacciones).

El transporte y transformación de productos químicos a través de la zona no saturada depende de muchos factores (Ver Figura 1): exclusión de iones, intercambio de iones, volatilización, disolución y precipitación, transformaciones químicas y biológicas, biodegradación, adsorción, difusión, dispersión y contenido de agua volumétrico y conductividad hidráulica no saturada; éstos se pueden clasificar en tres grandes grupos, físicos, químicos, y microbianos como se muestra en la Figura 1.



**Figura 1.** Diversos Procesos que Ocurren en la Zona No Saturada.

Tomado de Tindall et al., 1999.

La combinación de las características del subsuelo, contaminantes y condiciones climatológicas del sitio pueden dar lugar a los diferentes procesos de transporte y distribución de contaminantes.

Para entender el transporte y destino de los contaminantes en el subsuelo es necesario realizar una buena caracterización del sitio con la cual se conocerán la carga hidráulica y la estratigrafía, así como los coeficientes de adsorción y la permeabilidad del suelo.

Con esta información es posible calibrar modelos matemáticos que sean representativos de la distribución tridimensional de los contaminantes en el sitio (Salinas, 2001).

**Tabla 1.** Procesos de Transformación y Transporte.

CATEGORY	PROCESS	FACTORS AFFECTING PROCESS
Physical	Advection Dispersion Flow in Fractures Diffusion Precipitation Dissolution	Topography Climate Precipitation Soil Type Vegetative Cover Depth to Ground Water Soil - Hydraulic Conductivity Soil - Void Ratio Soil - Moisture Characteristics Geology Hydrology Morphology
Chemical	Partitioning • Sorption / Desorption • Ion Exchange • Volatilization Equilibrium Speciation • Acid / Base Equilibration • Organic Complexation • Inorganic Complexation Abiotic Transformation • Hydrolysis • Oxidation / Reduction	Physical, Chemical Properties of Contaminants Geology
Microbial	Oxidation / Reduction and Hydrolysis	Geology Contaminants Microbial Environment

Tomado de Tindall et al., 1999.

## 1.2.1 Mecanismos de Transporte

### 1.2.1.1 Lixiviación

En este proceso, el agua de los poros es desplazada por el movimiento del agua haciendo que el producto químico en el agua de los poros sea removido del suelo. Así, el agua contaminada de un suelo puede moverse a otras áreas transportando la contaminación.

Los factores determinantes en la lixiviación incluyen: solubilidad, biodegradación, disociación, adsorción, volatilidad, precipitación y evapotranspiración. Los efectos de la movilidad se describen así [6]:

- Un compuesto químico que es soluble en agua puede lixiviarse en el suelo y probable ser biodegradado. Si la biodegradación es rápida, entonces la lixiviación no es un problema.
- Un compuesto químico que es insoluble en agua puede ser adsorbido en el suelo, moviéndose con las partículas, y posiblemente sea biodegradado lentamente.
- Los compuestos químicos en la superficie del suelo pueden ser fototransformados y no ser disponibles a lixiviarse, sin embargo, éstos pueden ser disipados.

- Entre más precipitación mayor será la posibilidad de los contaminantes químicos a lixiviarse.
- La hidrólisis y la disociación pueden prevenir la lixiviación.

### 1.2.1.2 Advección

De acuerdo con Schnoor (1996), el transporte advectivo es el movimiento de masa (solutos), el cual es arrastrado por una corriente que viaja de un punto a otro. Para un producto químico disuelto que viaja en horizontes de arena y grava gracias a una corriente, el transporte advectivo es el producto de la tasa de flujo volumétrico y de la concentración. Así,

$$J = uAC = QC \quad (2)$$

Donde  $J$  es la tasa de descarga de masa ( $MT^{-1}$ ),  $u$  es la velocidad principal de la corriente ( $LT^{-1}$ ),  $C$  es concentración ( $ML^{-3}$ ), y  $Q$  es la tasa de flujo volumétrico ( $L^3T^{-1}$ ).

Durante condiciones de flujo constante ( $dQ/dt = 0$ ) y estado estable ( $QC/dt = 0$ ), la tasa de descarga de masa es constante con respecto al tiempo. Si la tasa de flujo o la concentración varía con el tiempo, la tasa de descarga de masa (transporte advectivo de masa) también lo hará. El cambio en masa con respecto al tiempo debido a la advección se puede escribir como una ecuación diferencial:

$$\Delta(VC) = (Q_a C_a - Q_b C_b) \Delta t \quad (3)$$

Donde  $C_a$  es la concentración entrando al volumen de control y  $C_b$  la concentración que sale del volumen de control.

### 1.2.1.3 Difusión

#### Difusión Turbulenta

La difusión turbulenta se refiere a la mezcla de sustancias disueltas y partículas finas causada por turbulencia a microescala. Es un proceso advectivo a nivel de microescala causado por fluctuaciones en un flujo de cortante turbulento. Los esfuerzos cortantes son suficientes para causar la mezcla. Este es mayor que la difusión molecular en varios órdenes de magnitud y es un factor que contribuye a la dispersión. La difusión turbulenta puede ocurrir en las tres direcciones pero es generalmente anisotrópica (es decir, existen direcciones preferenciales para la mezcla turbulenta debido a la dirección y a la magnitud de los esfuerzos cortantes) [5].

#### Difusión Molecular

En el libro *Environmental Modeling: Fate and Transport of Pollutants in Water, Air, and Soil* se define la difusión molecular como la mezcla y movimiento de productos químicos disueltos a través de líquidos, bajo condiciones estáticas, en capas límite finas, laminares, tales como las que pueden ocurrir en las interfaces (aire-agua, sedimento-agua, partícula-agua) o en el agua estancada que se encuentra en los poros del sedimento. Es causada por energías ó las cinéticas de movimientos vibratorio, rotatorio, y de translación molecular. Energéticamente, la difusión molecular es una reacción



espontánea, la cual corresponde a un aumento en la entropía haciendo que las sustancias disueltas se muevan de regiones de alta concentración a regiones de baja concentración según las leyes de difusión de Fick.

La acción de la difusión molecular (dispersión físico-química) puede ser clasificada en dos tipos, longitudinal donde las diferencias de concentración tienden a desaparecer y lateral donde hay una transferencia de masa que tiende a anular las diferencias de concentración. La difusión molecular no es generalmente un proceso importante en el transporte de sustancias disueltas en aguas naturales excepto en el transporte a través del agua de los poros del sedimento.

La difusión molecular es descrita principalmente por la primera ley de Fick,

$$F_m = -D \frac{dc}{dx} \quad (4)$$

Donde  $D$  es el coeficiente de difusión molecular ( $L^2T^{-1}$ ),  $dC/dx$  es el gradiente de concentración ( $ML^{-3}L^{-1}$ ) y  $F_m$  es la tasa del flujo de masa por área ( $ML^{-2}T^{-1}$ ). La difusión molecular es un fenómeno excesivamente lento, en el orden de  $10^{-5} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  los coeficientes de difusión moleculares indican un movimiento muy lento de masa.

Mientras que el contenido de agua disminuye en un suelo, la difusión molecular predomina sobre la dispersión mecánica, puesto que la dispersión depende de la velocidad de flujo. En un suelo con una distribución uniforme del tamaño de los poros y una baja conductividad hidráulica, la difusión molecular es predominante pues la velocidad de flujo tiende a cero.

#### 1.2.1.4 Dispersión

Según Schnoor (1999), la interacción de la difusión turbulenta con los gradientes de velocidad causados por las fuerzas cortantes en un cuerpo de agua causa un mayor grado de mezcla, conocido como dispersión. El proceso de dispersión es análogo a la difusión molecular pero ocurre en una tasa mucho más rápida.

La dispersión ocurre en el agua subterránea, no debido al flujo turbulento (el flujo del agua subterránea es laminar), sino a la dispersión mecánica y a la trayectoria tortuosa que el agua subterránea debe seguir a través de los medios porosos. La no homogeneidad causa variaciones microscópicas y macroscópicas en la conductividad hidráulica que conducen en última instancia a la dispersión.

El coeficiente de dispersión se relaciona directamente con la velocidad en los medios porosos, como se muestra a continuación:

$$D_x = \alpha_x U_x + D \quad (5)$$

$$D_y = \alpha_y U_y + D \quad (6)$$



Donde  $D_X$  y  $D_Y$  son los coeficientes longitudinal y lateral de dispersión, respectivamente ( $L^2T^{-1}$ ),  $\alpha_X$  y  $\alpha_Y$  las dispersividades longitudinal y lateral, respectivamente (L),  $U_X$  y  $U_Y$  las velocidades longitudinal y lateral, respectivamente ( $LT^{-1}$ ) y  $D$  el coeficiente de difusión molecular ( $L^2T^{-1}$ ). Velocidades más grandes causarán el esparcimiento del contaminante debido a la creación de más trayectorias de flujo. La dispersividad es mayor en la dirección del flujo.

### **Dispersión Mecánica**

La mayoría de la dispersión es causada por la presencia de sólidos a través de los caminos porosos del suelo de diversos tamaños que varían espacialmente, y son dependientes de la distribución estadística de la velocidad del líquido. La distribución de la velocidad de un fluido moviéndose en un medio poroso no es uniforme, por que (Salinas, 2001):

- Los fluidos son viscosos, entonces la velocidad del fluido en superficies sólidas de la matriz de suelo es cero, lo que crea un gradiente de velocidad en el fluido.
- Las variaciones en las dimensiones de los poros crean discrepancias en las velocidades máximas a lo largo de los ejes de los poros.
- Las líneas de corriente no coinciden con la dirección media del flujo.

La observación de estos fenómenos, sugiere la existencia de dos efectos básicos, el primero en la dirección de la velocidad media (a lo largo de la línea del flujo), debido a diferencias entre los distintos componentes de la velocidad en la dirección del flujo; el segundo es más pequeño en alcance y ocurre en el plano ortogonal al flujo debido a diferencias entre los componentes de la velocidad en ese plano. Estos efectos son respectivamente Dispersión Longitudinal y Dispersión Lateral.

### **Dispersión Hidrodinámica**

En el libro *Unsaturated Zone Hydrology for Scientists and Engineers* se describe la dispersión hidrodinámica como un proceso no constante e irreversible (es decir, la distribución inicial de un contaminante no puede ser obtenida invirtiendo el flujo) en el cual la masa del contaminante se mezcla con una porción de la solución. Esto es debido a la presencia de flujo a través de un sistema de caminos tortuoso dentro de la matriz de suelo.

La dispersión hidrodinámica consiste en dos partes, dispersión mecánica (Convección) y difusión molecular; estas dos condiciones son totalmente inseparables ya que ambas ocurren simultáneamente.

La dispersión mecánica ocurre a nivel del poro y predomina en lugares con altos contenidos de agua y grandes velocidades de flujo porque es aquí donde las partículas del contaminante se mezclan libremente con el agua de los poros del suelo, mientras el agua bordea las partículas individuales. La difusión molecular predomina en lugares con bajos contenidos de agua y bajas velocidades de flujo, siempre y cuando los fenómenos químicos asociados a un trazador o a un contaminante continúen, aunque la dispersión mecánica debida al movimiento del agua haya cesado; ésta solamente ocurre a nivel molecular, en ausencia de movimiento (en un suelo y/o una solución).





El flujo de dispersión hidrodinámica es escrito en la misma forma que la difusión molecular, y puede ser expresado como:

$$J_H = -D_H \frac{dc}{dz} \quad (7)$$

Donde  $D_H$  es el coeficiente de dispersión hidrodinámica ( $L^2 T^{-1}$ ),  $C$  es la concentración ( $M L^{-3}$ ), y  $z$  es la distancia vertical (L). Este coeficiente se considera proporcional a la velocidad del agua de los poros,  $v$ , y se ha expresado como  $D_H = \alpha v$ , donde  $\alpha$  es la dispersividad.

## 1.2.2 Mecanismos de Transformación

Las principales fases que influyen la redistribución de los contaminantes del suelo son las fases abióticas; la atmósfera, los sólidos del suelo y el agua de los poros.

### 1.2.2.1 Degradación

El comportamiento químico del suelo es fundamental para la degradación de productos químicos orgánicos; en general, cinco reacciones pueden ocurrir en el suelo: Hidrólisis, Sustitución, Eliminación, Oxidación y Reducción. Las dos reacciones más importantes para la transformación de contaminantes orgánicos son (Salinas, 2001):

- Oxidación: Se presenta en el suelo afectando compuestos químicos aromáticos por medio de la oxidación de radicales libres (benceno, etilbenceno, naftaleno y fenol).
- Reducción: Definido en términos de transferencia de electrones, involucra compuestos orgánicos en sistemas agua-arcilla. El efecto se acelera con el aumento de agua sugiriendo la existencia de un mecanismo de transferencia de electrones, donde la arcilla actúa como aceptor. En general, se espera que un producto químico orgánico experimente una reducción química si el potencial del suelo es menor que el del compuesto orgánico en cuestión.

### 1.2.2.2 Volatilización

La volatilización es un proceso importante para la remoción de contaminantes del suelo. Un compuesto puede estar distribuido entre las partículas sólidas de suelo y el agua de los poros presente entre las partículas. La difusión en el agua de los poros ocurre, y algunas moléculas químicas eventualmente alcanzan la superficie del agua de los poros y se evaporan junto con las moléculas de agua. La volatilización depende de [4]:

- Las características inherentes de los productos químicos, como peso molecular, polaridad y otras características que gobiernan la presión de vapor y la constante de la ley de Henry. Así un compuesto químico con una baja presión de vapor tiene una alta capacidad de adsorción y/o una alta solubilidad en agua siendo menos probable su volatilización.

- Las características del suelo, como el contenido de carbono orgánico y de agua. Entre más alto el contenido de carbono orgánico, más baja la tasa de evaporación.; suelos con altos contenidos de agua presentan tasas más altas de evaporación; esto puede deberse a que el alto contenido de agua resulta en una gran pérdida de agua del suelo y con esto una mayor cantidad de contaminante.
- Las condiciones ambientales tales como temperatura y velocidad del aire en la superficie, influyen los procesos nombrados anteriormente; con un aumento en estos factores se llega a tasas crecientes de volatilización.

### 1.2.2.3 Adsorción

Una de las reacciones más importantes que los contaminantes pueden experimentar en el subsuelo es la adsorción como lo menciona Schnoor en su libro *Environmental Modeling: Fate and Transport of Pollutants in Water, Air, and Soil*. El término adsorción indica un número de posibles mecanismos para retirar agentes contaminantes a partir de la fase acuosa e inmovilizarlos en las partículas del medio poroso. Los mecanismos para la adsorción de solutos en las partículas sólidas incluyen:

- Partición hidrofóbica de los productos químicos orgánicos (absorción) en las capas orgánicas o la materia orgánica contenida en el subsuelo.
- Adsorción de productos orgánicos y de metales en la superficie de partículas por electrostática y/o coordinación química superficial.
- Intercambio de iones de los metales y los ligantes en los sitios de intercambio y en las capas intermedias de arcilla.

Para concentraciones bajas de contaminantes típicos en agua subterránea, se puede asumir una adsorción lineal isotérmica. Generalizando la discusión para todas las reacciones de adsorción (los productos orgánicos y los metales) se introduce una constante de equilibrio lineal,  $K_D$ , que se deriva de las mediciones de campo o laboratorio.

$$S = K_D C \quad (8)$$

Donde  $S$  es la cantidad adsorbida en el medio poroso ( $M M^{-1}$ ),  $K_D$  el coeficiente de distribución ( $V M^{-1}$ ) y  $C$  la concentración del soluto ( $M V^{-1}$ ). Para el caso de un contaminante conservativo transportado a través de un acuífero homogéneo y unidimensional, se puede simplificar la ecuación (9) despreciando los vectores de la velocidad  $u_y$  y  $u_z$  y los coeficientes de dispersión  $D_y$  y  $D_z$ .

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \left[ u_x \frac{\partial C}{\partial x} + u_y \frac{\partial C}{\partial y} + u_z \frac{\partial C}{\partial z} \right] + \left[ D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \pm \sum r_m \quad (9)$$

El transporte y reacción del contaminante en el medio poroso se pueden representar como una ecuación parcial diferencial de segundo orden con coeficientes constantes en una dimensión.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \pm \sum_{m=1}^n r_m \quad (10)$$

El término de la reacción en la ecuación 10 se refiere a un número de reacciones posibles. Para los contaminantes orgánicos, adsorción, biodegradación, hidrólisis, reacciones redox, y volatilización (en la zona no saturada). Para los metales, las reacciones principales son adsorción, intercambio de iones, y reacciones redox para elementos con estados de valencia múltiples. Los metales contaminantes tales como  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ , y  $\text{Cu}^{2+}$  también se pueden liberar de los sitios de adsorción en los óxidos de hierro y manganeso, ya que, al reducir las condiciones dan lugar a la disolución y reducción de los óxidos.

En la ecuación 10 se puede incluir explícitamente la adsorción. Así,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial S}{\partial t} \frac{\rho_s(1-n)}{n} \pm \sum r_i \quad (11)$$

*ΔConcentración = -Advección + Dispersión - Sorción ± Reacciones*

Donde  $\rho_s$  es la densidad de las partículas sólidas ( $\text{ML}^{-3}$ ),  $n$  la porosidad efectiva (adimensional) y  $r_i$  las reacciones químicas y biológicas ( $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ ).

### 1.3 NATURALEZA QUÍMICA DEL PETRÓLEO

El petróleo es una mezcla de hidrocarburos los cuales están compuestos por gases, líquidos y sólidos, con pequeñas cantidades de mezclas de nitrógeno, oxígeno y azufre, además de compuestos de hierro, níquel, vanadio y otros metales. La palabra petróleo proviene del latín *petra* y *oleum*, esta significa literalmente “aceite de piedra”; y da una cierta indicación de su origen. El petróleo es un fluido espeso cuyo color y composición varían bastante; tiene una proporción de 76 a 86% de carbono, e hidrógeno de 10 a 14%. Su densidad (gravedad específica) es del orden de 0.75 y 0.95, es decir más ligero que el agua.

La materia orgánica, derivada del detrito de microorganismos, plantas y animales en el fondo de antiguos cuerpos de agua, se deposita y se va cubriendo por sedimentos; al quedar cada vez a mayor profundidad, se transforma en hidrocarburos (degradación primaria por bacterias aerobias y secundaria por anaerobias); estas transformaciones producen oxígeno, nitrógeno y azufre, elementos que forman parte de los compuestos volátiles de los hidrocarburos. A medida que los sedimentos se compactan por efectos de presión y temperatura, se forma la "roca madre"; posteriormente, por fenómenos de "migración", el petróleo pasa a impregnar capas o estratos de arenas o rocas más porosas y permeables (areniscas, calizas fisuradas, dolomías), en las cuales el petróleo se concentra y permanece (Ruiz et al., 2000).

#### 1.3.1 Hidrocarburos

Los hidrocarburos son compuestos de carbono e hidrógeno que pueden clasificar, según el tipo de enlace (Ver Figura 2).

El petróleo está constituido en un 50 al 90% por hidrocarburos de tipo aromáticos y alifáticos saturados (alcanos), como n-alcanos (parafina), alcanos ramificados, cicloalcanos. El petróleo generalmente no contiene hidrocarburos no saturados (alquenos y alquinos). Éstos se encuentran en los productos de petróleo refinados, a menudo como resultado de procesos catalíticos en las refinerías. Estos procesos cambian el tamaño y, en algunos casos, la relación hidrógeno-carbono de las moléculas, con la idea de promover una producción más alta de combustibles para el transporte más provechosos (gasolina y diesel).



Figura 2. Clasificación General de los Hidrocarburos.

### 1.3.1.1 Alcanos

Las temperaturas de fusión y ebullición aumentan con el número de carbonos. Son menos densos que el agua y solubles en disolventes apolares. Son inertes debido a la elevada estabilidad de los enlaces C-C y C-H y a su baja polaridad. No se ven afectados por ácidos o bases fuertes ni por oxidantes como el permanganato. Sin embargo la combustión es exotérmica aunque tiene una elevada energía de activación (Baeza, 1999).

### 1.3.1.2 Aromáticos

Los hidrocarburos aromáticos policíclicos (HAP's) están formados por dos o más anillos de benceno fusionados, los cuales difieren en el número y posición del anillo aromático. Hay dos clases de hidrocarburos aromáticos [18]:

- Los de bajo peso molecular (naftaleno) que tienen de 2 a 3 anillos aromáticos.
- Los de alto peso molecular (criseno) que tienen de 4 a 7 anillos aromáticos.

Su importancia está relacionada a su movilidad, debido a su peso molecular. Los HAP's de alto peso molecular son relativamente inmóviles y, por ende, de baja volatilidad y solubilidad.

De acuerdo con Connell et al. (1997), los n-alcanos se encuentran en todos los petróleos. El contenido de alcanos ramificados en el petróleo es igual o mayor al contenido de n-alcanos. Las ramas son usualmente los grupos metílicos (CH<sub>3</sub>). Los cicloalcanos usualmente son el grupo más grande de hidrocarburos por masa en el petróleo, los más abundantes en el petróleo contienen 5 o 6 átomos de carbono en el anillo, es decir, ciclopentanos y ciclohexanos. Los hidrocarburos aromáticos están generalmente presentes ocupando un 20% de masa o menos.



## 1.4 HIDROCARBUROS DEL PETRÓLEO EN EL SUELO

Según la monografía de Salinas, el comportamiento de un contaminante es función de sus características físicas y químicas, de las características del medio y de factores climatológicos, como se menciono anteriormente. El conjunto de estas variables define el tamaño y la distribución del frente de contaminación en una zona específica (Ver Tabla 2).

**Tabla 2.** Parámetros de Contaminante, Suelo y Ambiente que Influyen en el Transporte a Través del Suelo.

Parámetros del Contaminante	Parámetros del Suelo	Parámetros Ambientales
Solubilidad	Contenido y retención de agua	Temperatura
Presión de vapor	Porosidad, densidad y permeabilidad	Precipitación
Número y tipo de grupos funcionales	Contenido de arcilla	Evapotranspiración
Polaridad	Contenido de materia orgánica	
	Profundidad de agua subterránea	

Tomado de Salinas, 2001.

Los compuestos orgánicos ligeros como las gasolinas, aceites y petróleo crudo tienden a formar una capa en forma de nata sobre el nivel freático y se mueven horizontalmente en dirección al flujo del agua subterránea. Los compuestos orgánicos densos, migran hacia la base del acuífero creando una columna la cual se mueve en dirección al flujo de agua subterránea, contaminando así el acuífero en toda su profundidad.

Las propiedades físicas del suelo más afectadas por derrames de hidrocarburos son:

- La estructura del suelo debido a la ruptura de los agregados.
- La retención del agua en la capa superficial (Aumenta).
- El potencial hídrico.

Las propiedades químicas del suelo más afectadas por un derrame de hidrocarburos son:

- El carbono orgánico, aumenta ya que el 75 % del carbono del petróleo es oxidable.
- El pH, disminuye debido a la acumulación del carbono orgánico y a la generación de ácidos orgánicos.
- La cantidad de manganeso y hierro intercambiable (Aumenta).
- La cantidad de fósforo disponible (Aumenta).

### 1.4.1 Parámetros del Contaminante

#### 1.4.1.1 Solubilidad en agua

Es la característica química más importante usada para asegurar, en el ambiente, la movilidad, estabilidad, acumulación y adsorción química. La alta solubilidad en agua de un compuesto químico promueve su mayor movilidad, haciéndolo menos probable a ser acumulativo, volátil y persistente; un compuesto químico altamente soluble es propenso a ser biodegradado y metabolizado por los microorganismos. Un contaminante químico



poco soluble en agua es más probable a ser inmovilizado vía adsorción y menos móvil, más acumulativo, persistente y ligeramente propenso a biodegradarse [4].

#### 1.4.1.2 Presión de vapor

En el caso de los HAP's de bajo peso molecular (2 anillos), el valor de presión de vapor es de,  $10^{-4}$  atm indicativo de ser volátiles al ambiente y los de alto peso molecular (>5 anillos) tienen un valor de  $10^{-13}$  atm, los cuales tienden a quedarse en el suelo. Los alifáticos de peso molecular bajo ( $C_5H_{12}$ ) presentan valores de 1 atm y los de peso molecular alto ( $C_{18}H_{36}$ ) valores de  $10^{-7}$  atm (Connell et al., 1997).

Un compuesto químico con una presión de vapor baja, alta capacidad de adsorción o alta solubilidad en agua es menos probable a volatilizarse (principalmente compuestos orgánicos de alto peso molecular). Por otra parte, un compuesto químico con una presión de vapor alta, es más probable a volatilizarse.

#### 1.4.1.3 Polaridad

En el libro *Basic Concepts of Environmental Chemistry* la polaridad se refiere a la existencia o no de una distribución equitativa de las nubes electrónicas que forman varios enlaces. Si no es equitativa, una parte de la molécula será más positiva y la otra más negativa. Por tanto, la molécula se comporta como un dipolo o una molécula polar. Por otra parte, si las nubes están bien distribuidas, se dice que la molécula es no polar. La polaridad depende de la electronegatividad de los átomos y la forma de la molécula, si no hay diferencia de electronegatividad entre los átomos, la molécula será no polar.

Todos los compuestos orgánicos contienen carbono y la mayoría también hidrógeno, debido a que existe una leve diferencia en electronegatividad entre el carbono y el hidrógeno; la mayoría de los compuestos son no polares.

Los hidrocarburos alifáticos son compuestos no polares y los aromáticos son polares. Se ha determinado que compuestos no polares o débilmente polares tienen afinidad por las fases orgánicas hidrofóbicas en ácido húmico sirviendo las fuerzas de Van der Waals o la atracción hidrofóbica como unión de enlace.

### 1.4.2 Parámetros del Suelo

Los hidrocarburos se pueden encontrar de la siguiente forma en el suelo: líquida, soluble en el agua del suelo, adsorbidos por el suelo y en la atmósfera edáfica. Las propiedades y condiciones que afectan la migración, retención y transformación de compuestos orgánicos en el suelo se muestran a continuación (Salinas, 2001).

#### 1.4.2.1 Materia orgánica

La materia orgánica se deriva principalmente de la actividad de los microorganismos en el detrito de las plantas que entra al suelo como resultado de la muerte de éstas. Químicamente, el componente principal en las plantas que contribuye a la formación de



materia orgánica en el suelo es la lignina. Esta se mide como el contenido de carbono orgánico del suelo, varía entre el 0.1 y el 7% del suelo total y es el componente más importante para la adsorción de productos químicos no iónicos, no polares [4].

Este parámetro tiende a aumentar por el incremento de los sitios de adsorción en el suelo, disminuyendo la concentración en la fase acuosa y gaseosa del contaminante orgánico como también su transporte. La adsorción es afectada por dos factores:

- La hidrofobicidad del contaminante (dificultad para disolverse en agua).
- La fracción de la materia orgánica en el suelo (contenido de carbono orgánico).

Las moléculas no polares o débilmente polares tienen una gran afinidad por fases orgánicas hidrofóbicas en ácidos húmicos con fuerzas de atracción débil (Van der Waals) o bien una atracción hidrofóbica. Las polares sin carga, muestran una afinidad por grupos polares húmicos, sitios de coordinación de metales multivalentes en coloides, superficies minerales con grupos Si-O-Si a través de fuerzas dipolo-dipolo y ion-dipolo (ligeramente fuerte a débil). Este comportamiento es debido a que las moléculas no polares, tienen una mayor atracción hacia la materia orgánica que hacia las superficies de los minerales, donde la existencia de las superficies hidrofóbicas o enlaces dentro de la matriz orgánica son las que favorecen el fenómeno de atracción hidrofóbica, la cual llega a ser una fuerza conductora de la absorción, si el adsorbente orgánico tiene una baja afinidad por el agua.

#### 1.4.2.2 Contenido de agua

De acuerdo con Connell et al. (1997), el contenido de agua ejerce un control sobre el potencial de crecimiento de microorganismos. Los suelos secos no soportan una población en activo crecimiento, mientras que los húmedos pueden soportar grandes poblaciones de microorganismos. Es decir fomenta la biodegradación de los contaminantes.

El contenido de agua tiene también gran influencia en el transporte de difusión líquida o gaseosa. Para la difusión líquida el transporte aumenta con el contenido de agua debido a su trayectoria en los espacios porosos reemplazando el aire contenido; inversamente, la difusión de vapor disminuye con el contenido de agua. Cuando el contenido de agua disminuye a un bajo porcentaje, las moléculas que ocupaban los sitios de adsorción son desplazadas y la capacidad de adsorción química aumenta considerablemente causando que las concentraciones líquida y gaseosa disminuyan reduciendo el mecanismo de transporte líquido y gaseoso. Sin embargo, este efecto de adsorción es reversible cuando la superficie vuelve a rehumedecerse.

Las moléculas de un material dado pueden adsorberse de la fase gaseosa o líquida al sólido por fuerzas de Van der Waals, este proceso es llamado adsorción y puede alcanzar el equilibrio en un tiempo limitado, principalmente por las velocidades de difusión molecular. El agua es un medio de transporte, principalmente, para sustancias menos adsorbentes y más polares como es el caso de los alcoholes seguido por los aromáticos y finalmente los alifáticos.



### **1.4.2.3 Textura del suelo**

La lixiviación en texturas rugosas (arena y grava) es más rápida que en texturas lisas (arcillas), con mayor capacidad de retener los contaminantes y prevenir su alcance a aguas subterráneas. Además, otros parámetros dinámicos como la permeabilidad, la conductividad hidráulica y la porosidad son función de la textura.

El contenido de arcilla está correlacionado con la capacidad de campo, área superficial específica y capacidad de intercambio catiónico influyendo en la adsorción de iones. De igual manera, la persistencia se ve afectada por el contenido de arcilla, ya que cuantas más pequeñas son las partículas, esta aumenta debido a que las partículas aportan un gran área superficial para la absorción de los productos químicos.

Estas características dan una medida de cómo la arcilla afecta el comportamiento de las moléculas polares orgánicas y de los iones metálicos. Para compuestos orgánicos no polares, generalmente no existe correlación entre el contenido de arcilla y la adsorción.

### **1.4.2.4 Estructura del suelo**

Generalmente se presentan fisuras, grietas o canales que sirven como vías de transporte, permitiendo corrientes transitorias de grandes volúmenes de un contaminante a las aguas subterráneas. En la ausencia de tales canales, la agregación estructural de los suelos induce un flujo más rápido en los macroporos, que dentro de los microporos donde los contaminantes potenciales pueden ser retenidos. En ocasiones, la estructura del suelo favorece la concentración del contaminante en corrientes verticales o convergentes que generalmente comienzan en la transición de texturas finas a capas de textura granular, con un gran volumen de la zona superficial y siguiendo un transporte directo de contaminantes al nivel freático.

### **1.4.2.5 Profundidad del nivel freático**

Determina el tiempo y espacio de la retención y degradación del contaminante previo a su penetración en el acuífero, dado por las propiedades de retención del perfil del suelo.

## **1.4.3 Parámetros Ambientales**

### **1.4.3.1 Temperatura**

La presión de vapor es función de la temperatura, al tener un valor bajo ( $10^{-4}$  atm) la fracción de un compuesto orgánico pasa rápidamente a la fase gaseosa. Por esta razón la difusión gaseosa es mucho más importante que la difusión líquida.

### **1.4.3.2 Precipitación**

La precipitación afecta la velocidad de flujo en el suelo; los suelos en regiones con lluvia intensa y frecuente tienen altos flujos de agua y de dispersión, extendiendo la difusión líquida y disminuyendo la gaseosa.





### 1.4.3.3 Evapotranspiración

En la monografía de Salinas se argumenta que la evapotranspiración afecta el flujo de agua debajo de la zona de raíces de las plantas y la lixiviación de los compuestos. La cantidad de agua lixiviada en suelos que no reciben entrada de agua por irrigación está determinada por el agua de lluvia menos el agua de evapotranspiración.

Este parámetro es positivo, si implica un drenaje con movimiento descendente y negativo, si existe un proceso de secado con un bajo contenido de agua e induciendo un flujo ascendente de agua subterránea. Esto puede ser regulado por las condiciones meteorológicas externas como la radiación solar, viento, temperatura y humedad ambiente o por la resistencia del suelo o planta.

## 1.4.4 Transporte y Transformación de los Hidrocarburos

### 1.4.4.1 Dispersión

Los hidrocarburos del petróleo son emitidos o descargados en todas las fases del ambiente: aire, agua y suelo. La dispersión es probablemente el proceso más significativo que afecta los hidrocarburos del petróleo en las primeras 6 a 10 horas después de la descarga. El principal factor que favorece un aumento en el área de un derrame es la gravedad y las fuerzas de fricción, entre otras, tienden a oponerse a esta dispersión [3].

### 1.4.4.2 Evaporación

En el libro *Basic Concepts of Environmental Chemistry* la evaporación se define como un proceso en el cual las moléculas se escapan de la superficie de un líquido a una fase gaseosa o a la atmósfera, el cual puede ser particularmente importante en los primeros días del derrame.

La evaporación remueve el peso molecular más bajo, los componentes más volátiles de la mezcla del petróleo. La fracción volátil que se puede perder esta entre el 20 y el 50%, para los productos del petróleo refinados tales como la gasolina y el querosén. La tasa de evaporación depende de la concentración del compuesto en el derrame, de su punto de ebullición y presión de vapor. A medida que las moléculas son más grandes, su presión de vapor disminuye y el punto de ebullición aumenta.

### 1.4.4.3 Disolución

Connell et al. (1997), asegura que los hidrocarburos más volátiles, y con más bajo peso molecular tienden a ser más solubles en agua. Generalmente, para los hidrocarburos de más bajo peso molecular, la evaporación es más importante que la disolución. El orden de solubilidad acuosa de los hidrocarburos es aromáticos > cicloalcanos > alcanos ramificados > n-alcanos. Hay varias razones que explican estas diferencias, como el tamaño de la superficie de la molécula y el momento dipolo.



#### **1.4.4.4 Fotooxidación**

En presencia de oxígeno, la luz del sol puede transformar o degradar los componentes de las mezclas de petróleo. La fotooxidación es la oxidación iniciada por la luz, particularmente los rayos UV. Al contacto con esta luz, un número de cambios físicos y químicos ocurren en el petróleo [3].

Un químico puede ser fototransformado tanto como pueda absorber luz solar. Las influencias ambientales tienen un efecto en la velocidad de fototransformación, tales como: la profundidad del químico en el suelo y en el agua, adsorción en el suelo y pH. La velocidad de fotólisis puede determinar el tiempo de residencia del contaminante en el ambiente (Salinas, 2001).

#### **1.4.4.5 Transformación microbiana**

La mayoría de los componentes del petróleo (compuestos orgánicos volátiles) pueden ser transformados por una variedad de microorganismos; esto depende de factores tales como el número y tipo de microorganismos presentes y la disponibilidad de oxígeno y nutrientes. Las bacterias usan los hidrocarburos como fuente de carbono y energía. El contenido de oxígeno en suelo es frecuentemente un factor limitante en la biorremediación (Connell et al., 1997).

Generalmente los n-alcenos, particularmente los más pequeños, son transformados más rápidamente por los microorganismos bajo condiciones aerobias. Los alcanos ramificados y los cicloalcanos son oxidados con menos facilidad por los microorganismos. Los compuestos aromáticos pueden también ser transformados por microorganismos (bajo condiciones aerobias y anóxicas).

### **1.5 CONTAMINACIÓN DEL SUELO CON HIDROCARBUROS EN COLOMBIA**

#### **1.5.1 Impacto de los Derrames de Petróleo**

El petróleo y sus derivados gobiernan la economía colombiana, es por esto que su producción y distribución se realiza prácticamente en todo el territorio nacional, beneficiando con su manejo a muchas personas; sin embargo, como se menciona en el informe Impacto de los Derrames de Petróleo en Colombia, este manejo conduce a la contaminación, especialmente del suelo, producida por los derrames de hidrocarburos lo cual no solamente conlleva a conflictos económicos sino técnicos y socioambientales, teniendo que enfrentar problemas como:

- La pérdida de esfuerzos físicos, económicos y humanos que realiza la industria para la producción de hidrocarburos.
- El malgasto de gran parte de los recursos económicos destinados a través del Fondo Nacional de Regalías para el desarrollo de las regiones.



- Los sobrecostos por la realización de planes de contingencia, dando lugar a que para la realización de nuevos proyectos se considere la posibilidad de que el oleoducto sea subterráneo (terrorismo), lo que implica grandes costos financieros y ecológicos. Adicionalmente se estima que para la atención de cada emergencia se necesita de un promedio de 100 personas sin contar el personal especializado que normalmente se encuentra en los distritos.
- La generación de posibles enfermedades en las poblaciones vecinas al lugar del derrame, además de la afectación de sistemas productivos regionales (cultivos).

Analíticamente los derrames se pueden observar desde dos perspectivas bien definidas:

- La primera está definida desde las actividades que registra la industria hidrocarburífera (extracción, exploración, transporte y refinamiento) en las que se pueden dar ocasionales derrames no intencionales causados por diversos motivos de orden técnico. Estos pueden caracterizarse por tener un mayor y relativo control.
- La segunda perspectiva hace referencia a acciones dirigidas contra la infraestructura de los recursos técnicos, físicos y humanos, sus objetivos son desestabilizar las instituciones a nivel nacional y crear caos a nivel regional y local, los actores principalmente involucrados lo constituyen la guerrilla, los carteles de la gasolina y las "rotulas" intencionales causadas por parte de la población que busca vinculación contractual de "mano de obra suelta o desempleada" a lo largo de los proyectos de hidrocarburíferos.

Según Uribe et al. (1992), infortunadamente, en la mayoría de proyectos petroleros que se han desarrollado, ha surgido el terrorismo como una variable adicional a las comúnmente consideradas dentro del marco de los planes de contingencia. Las pérdidas que sufrió la nación entre 1986 y 1991 por atentados a oleoductos, ascienden a \$197.000.000.000 millones. Esta suma equivale aproximadamente al 50% de la inversión total del Estado a nivel nacional en salud en ese mismo periodo. En efecto, el 3% de los derrames fueron causados por factores de tipo operacional y/o natural, que corresponden en realidad a las variables para las cuales se diseñan los planes referidos. Sin embargo, el terrorismo fue responsable del 97% de los eventos de derrames de petróleo registrados.

Los derrames sucedidos en los años mencionados, corresponden a cuatro veces la cantidad de petróleo derramado en el evento del "EXXON VALDEZ", ocurrido en las costas de Alaska el 24 de marzo de 1989, uno de los accidentes puntuales con contaminación extendida mas grande, con volúmenes de petróleo cercanos a los 240.000 barriles.

Solamente en el oleoducto Caño Limón - Coveñas, en el periodo comprendido entre enero de 1986 y diciembre de 1991, se reportaron alrededor de 194 atentados dinamiteros, los cuales ocasionaron el desperdicio de 805.922 barriles de petróleo crudo, lo que representa un promedio de 4.178 barriles derramados por la violencia guerrillera (Ver Tabla 3); entre enero de 1992 y marzo de 1997 sufrió 253 atentados más, derramándose 620.468 barriles de petróleo con un valor asociado de descontaminación de \$8.986.630.000.



Durante 1991 el oleoducto Transandino fue objeto de 13 atentados contra la línea y algunas baterías de producción en Orito, generándose derrames con volúmenes cercanos a los 30.000 barriles, los cuales corresponden prácticamente a dos días de producción. Esto, sin mencionar los recesos en producción al considerar que las estructuras de los pozos fueron averiadas, propiciando mayores consecuencias en contra de la producción [8].

**Tabla 3.** Información Atentados Oleoducto Caño Limón – Coveñas.

<b>Año</b>	<b>No. De Atentados</b>	<b>Vol. Petróleo Derramado Barriles</b>	<b>Costo de Descontaminación Pesos</b>
1986	23	108.618	\$ 336.210.000
1987	11	11.048	\$ 46.096.000
1988	50	326.396	\$ 1.807.356.000
1989	29	83.614	\$ 667.624.000
1990	23	100.03	\$ 1.161.376.000
1991	58	176.216	\$ 2.172.200.000
<b>TOTAL</b>	<b>194</b>	<b>805.922</b>	<b>\$ 6.190.862.000</b>

Tomado de Uribe et al., 1992.

El oleoducto Vasconia - Coveñas experimentó 65 atentados (1986-1997) con los cuales se vertieron al ambiente 168.327 barriles de crudo, asumiéndose un costo en reparaciones de \$1.216.762.000.

En el primer semestre de 1998 se produjeron 34 atentados, lo cual significa un derramamiento de crudo de 111.617 barriles, por lo cual el país dejó de percibir por concepto de regalías \$1.806.000.000; el costo en reparaciones ascendió a \$1.806.000.000 y el valor del crudo dejado de producir fue de \$59.713.000.000 (Uribe et al., 1992).

Los oleoductos dinamitados en el país no son únicamente el de Caño limón – Coveñas, Vasconia - Coveñas y el Transandino, entre Orito y Tumaco. Otros de la red del Distrito de Oleoductos como el Ayacucho - Coveñas o el Ayacucho - Barrancabermeja, se han visto afectados por las acciones terroristas.

### 1.5.1.1 Áreas afectadas

En Colombia, de acuerdo con Uribe et al. (1992), las áreas perjudicadas por los derrames de petróleo se ubican principalmente en la zona alta de la llanura Araucana en la región de la cuenca del río Catatumbo, que se caracteriza por ser abrupta y muy rica en arroyos, quebradas y ríos tributarios; en la llanura del valle medio y medio bajo del río Magdalena (departamentos de Santander, Cesar y Sucre, principalmente) y en los departamentos de Putumayo y Nariño, en donde la condición montañosa y quebrada de los terrenos ha impedido una acción de control de los derrames de petróleo realmente efectiva (Ver Tabla 4).

En la llanura del Magdalena, se han presentado los derrames más difíciles en cuanto a su control y manejo. La expansión del crudo ha comprometido hasta 1000 Ha de cuerpos de agua lénticos, cerca de 40 Km de ríos menos importantes (el Simaña) y unos 150 Km de



caños y arroyos secundarios o de invierno, en donde la contaminación de aguas freáticas y subterráneas adquiere una mayor relevancia que la de los cuerpos de agua superficiales.

**Tabla 4.** Ubicación de las Zonas Afectadas por Derrames de Petróleo del País.

Área Cuenca	Ríos Km	Caños Km	Ciénagas Has	Terrenos Has
Arauca	120	45	300	700
Catatumbo	180	30	--	300
Magdalena	40	150	1000	2500
Putumayo	60*	--	--	--
Casanare	--	25*	300*	--
<b>TOTAL</b>	<b>400</b>	<b>250</b>	<b>1600</b>	<b>3500</b>

\* Valores supuestos con base en consultas regionales

Tomado de Uribe et al., 1992.

### 1.5.1.2 Impacto socioeconómico

Las cifras de pérdidas derivadas de los derrames de petróleo a nivel nacional, registradas en el informe Impacto de los Derrames de Petróleo en Colombia, usualmente comprenden el volumen de petróleo desperdiciado y el costo de reparación de las instalaciones físicas, pero no así el de la limpieza de las zonas afectadas y las consecuencias ambientales.

**Tabla 5.** Costo Económico por Atentados al Oleoducto Caño Limón-Coveñas.

Item	Costo (Pesos)
Petróleo Derramado	\$ 5,056,000,000
Reparación Oleoducto	\$ 3,684,000,000
Descontaminación	\$ 6,190,000,000
Regalías No Causadas	\$ 32,344,000,000
Petróleo No Producido	\$ 149,370,000,000
<b>TOTAL</b>	<b>\$ 196,644,000,000</b>

Tomado de Uribe et al., 1992.

Las cifras existentes para el caso del oleoducto Caño Limón - Coveñas pueden dar una idea aproximada de la magnitud de los daños desde un punto de vista financiero para el periodo entre 1986 y 1991 (Ver Tabla 5).

Los derrames generados por terrorismo contra este oleoducto han demandado cerca del 90% de los gastos en que ha incurrido la industria del petróleo por este concepto. Desde ese punto de vista, las pérdidas directas derivadas de los atentados fueron, en el periodo comprendido entre enero de 1986 y diciembre de 1991, aproximadamente de \$15.000 millones. De este monto, el 33.9% corresponde al costo del crudo derramado, el 24.7% a la reparación de instalaciones y el 41.4% restante a las labores de descontaminación de las áreas afectadas.



## 1.5.2 Legislación Ambiental del Recurso Suelo

Regulaciones concernientes al tema de los recursos naturales en el territorio nacional (aire agua y suelo), son presentadas a continuación y tomadas del informe Legislación Ambiental y Contaminación del Recurso Suelo en Colombia; éstas tratan de manera general el problema de contaminación, sin embargo existe normatividad específica para el manejo de los recursos agua y aire. Por otro lado, la legislación sobre la contaminación del suelo es limitada, especialmente cuando se trata de contaminación con hidrocarburos; en Colombia existe una regulación (Resolución 1170 de 1997), que rige y limita el problema.

La Constitución Nacional presenta 17 artículos específicos, relacionados con la protección, conservación, control y mejoramiento de los recursos naturales: 49, 67, 79, 80, 81, 82, 88, 95, 277, 313, 317, 330, 331, 334 (Menciona específicamente, uso del suelo), 360, 361 y 366, a los cuales se refiere la Corte Constitucional.

El Código Penal de forma general se refiere a los delitos contra los recursos naturales (Artículos 242, 243, 244, 245, 246 y 247); en cuanto a la contaminación ambiental indica “El que ilícitamente contamine el ambiente, incurrirá, sin perjuicio de las sanciones administrativas a que hubiere lugar y siempre que el hecho no constituya otro delito, en prisión de uno a seis años y multa de cincuenta mil a dos millones de pesos”.

Entre los aspectos relacionados con los recursos naturales considerados en la ley 23 de 1973, se tiene: “Prevención y control de la contaminación del medio ambiente, mejoramiento, conservación y restauración de los recursos naturales renovables”. Define contaminación y contaminante y determina como bienes contaminables: “aire, agua y **suelo**”.

El Código Nacional de Recursos Naturales Renovables y de Protección al Medio Ambiente (Decreto 2811 de 1974), entre su articulado relacionado con el medio ambiente, específicamente con el recurso suelo, revela los artículos 8, 34, 178-180, 324-326.

### 1.5.2.1 Resolución 1170 de 1997

La Resolución 1170 de 1997 (noviembre 11) en cinco capítulos, dicta normas sobre las estaciones de servicio e instalaciones afines (ES). El Departamento Técnico Administrativo del Medio Ambiente DAMA por medio del artículo 10 del Acuerdo 19 de 1996 tiene la facultad de declarar las normas técnicas y estándares ambientales dentro del perímetro urbano de la ciudad [20]. A continuación se resumen algunas de las normas propuestas en la Resolución por capítulo.

#### Definiciones y Principios Generales

Se define como ES de combustibles, aquellos establecimientos destinados al almacenamiento y distribución de combustibles líquidos derivados del petróleo, excepto gas licuado del petróleo (GLP), para vehículos, a través de equipos fijos (surtidores) que llenan directamente los tanques de combustible.



Para los efectos de la Resolución se adoptan como definiciones las presentadas en esta misma sobre: instalaciones afines, cuerpos de aguas superficiales sensibles no protegidos, remodelación, contenedores de derrame, operador de ES y compuestos orgánicos volátiles (COV<sub>s</sub>); además de las contenidas en el capítulo I del Decreto Presidencial 1594 de 1984.

### **Construcción de Nuevas ES**

Las ES deben incluir aislamientos entre ellas y las zonas residenciales, comerciales, recreativas, naturales, institucionales o industriales aledañas. Como control a la contaminación de suelos, las áreas superficiales de las ES deben construirse con materiales impermeabilizantes que impidan infiltración de líquidos o sustancias en el suelo, además se debe garantizar el rápido drenaje del agua superficial, hacia las unidades de control.

Cuando se almacenen aceites y grasas en tanques subterráneos las paredes de la excavación deben revestirse de manera que se impida la percolación de cualquier sustancia contaminante en cualquier circunstancia previsible. Las ES deben disponer de estructuras para la intercepción superficial de derrames que permitan conducir hacia los sistemas de tratamiento y almacenamiento, los volúmenes de derrame.

Todas las ES deben contar con al menos tres pozos de monitoreo, dispuestos de manera que triangulen el área de almacenamiento. Dependiendo de las condiciones del suelo, se define la profundidad y ubicación precisa para cada uno de los pozos de monitoreo. La profundidad de estos pozos será como mínimo 1 metro por debajo de la cota fondo de los tanques de almacenamiento.

### **Operación de las ES**

En las zonas de alto riesgo ambiental, no se permite la instalación de ES; además estas deben disponer de sistemas automáticos y continuos para la detección instantánea de posibles fugas, ocurridas en los elementos, subterráneos de almacenamiento o conducción de productos combustibles.

Las ES ubicadas en predios localizados a 200 metros o menos de cualquier cuerpo de agua superficial sensible no protegido, deben realizar un plan de prevención y control de la contaminación de dicho cuerpo. Toda fuga de combustible de más de 50 galones, o emergencias que causen daños, debe ser reportada al DAMA.

### **Remodelación**

Los productos de excavación de las áreas de las estaciones de combustible sujetas a remodelación, deben realizar la medición de Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs) tomando muestras en las áreas de almacenamiento y distribución, de la anterior estación, cada 0.70 metros de profundidad, a partir del nivel superficial hasta una profundidad de 1.0 metro por debajo de la cota de fondo del foso. Constatada la ocurrencia de contaminación de suelo y/o subsuelo, se debe presentar una caracterización de BTEX (Benceno, tolueno, etil-benceno y xilenos), y HTP (hidrocarburos totales de Petróleo), así como el programa de descontaminación o remediación.



Los límites de limpieza para cada uno de estos suelos serán de acuerdo a lo estipulado en la Tabla 6.

**Tabla 6.** Límites de Limpieza para Suelos Expuestos a Hidrocarburos.

CARACTERÍSTICAS	BAJO IMPACTO (10 PUNTOS)	MEDIANO IMPACTO (9 PUNTOS)	ALTO IMPACTO (5 PUNTOS)
Nivel Freático (m)*	> 2 m	1.50 a 2 m	1 - 1.50 m
Suelo	Arcillo lita	Arcillo - Limoso	Areniscas NO Cons
Presencia de conductores verticales	Ninguno	1	> 1
Áreas sensibles	Ninguna	1	> 1
Med volátiles a la altura de respiración (ppm)	< 20	20 - 50	> 50
Med volátiles en excavación (ppm)	< 50	50 - 100	> 100
<b>NORMA A APLICAR DE ACUERDO AL TOTAL DE PUNTOS OBTENIDOS</b>			
Rango puntaje (sin incluir lectura de volátiles)	>38 Puntos	23 -38 Puntos	<23 puntos
Rango puntaje (incluyendo lectura de volátiles)	> 58 Puntos	47 - 58 Puntos	<47 Puntos
Máxima concentración permitida (BTEX - ppm)	Benceno = 10 Tolueno = 50 Etil-benceno = 50 Xileno = 50	Benceno = 0.5 Tolueno = 0.5 Etil-benceno = 1 Xileno = 1	NA
Máx conct permitida gasolina (HTP - ppm)	10	1	100
Máx conct permitida Diesel (HTM - ppm)	50	5	500
Para nivel freático menor a 1m usar 0 puntos. NA = No aplica. Concentración de BTEX en áreas de alta sensibilidad no son permitidas. La presencia de conductores verticales o identificación de áreas sensibles se determinan en un radio de acción de 100m. El puntaje es calculado para mediciones en cada uno de los parámetros y observaciones In-situ. La suma del impacto de acuerdo a la característica define la clase de impacto: bajo, mediano o alto.			

Tomado de Uribe, 1997.

### Desmantelamiento

El cese de actividades en un predio anteriormente empleado como sitio de distribución y almacenamiento de combustibles, debe incluir la verificación del estado ambiental del suelo y subsuelo a una cota de un metro por debajo de la cota inferior del foso del tanque de almacenamiento.

## 1.6 MÉTODOS DE REMEDIACIÓN

**Tabla 7.** Métodos de Remediación de Suelo y Agua Subterránea.

PHYSICAL	BIOLOGICAL	CHEMICAL	THERMAL
Coagulation / Flocculation	Activated Sludge	Neutralization	Incineration
Oil - Water Separation	Activated Sludge with PAC	Precipitation	Thermal Desorption
Air and Stream Stripping	Aeration Tank	Ion Exchange	Vitrification
Carbon Absorption	Aerobic and Anaerobic Fixed Film	Chemical Oxidation	
Filtration	Anaerobic Digester Tank	Chemical Reduction	
Reverse Osmosis	Fluidized Bed	Photolysis (Ultraviolet Light)	
Sedimentation	Rock - Reed Filter	Wet- Air Oxidation	
Evaporation and Distillation	Sequencing Batch Reactor	Stabilization	
Solvent Extraction	Trickling Filter	Dechlorination	
Freeze Crystallization	Composting	Soil Washing	
Centrifugation	In - Situ Biodegradation		
Sonic Treatment	Land Treatment		
Soil Venting	Liquid / Soil Systems		
Air Sparging	Wetlands Treatment		

Tomado de Tindall et al., 1999.





Hoy día los métodos de remediación de suelos contaminados son tan diversos como los mismos tipos de contaminantes y las condiciones de sitio. Se deben tener en cuenta varios factores que entran a jugar un papel importante al momento de escoger la técnica de remediación más apropiada, algunos de los aspectos a considerar son los siguientes:

- Condiciones de sitio como lo son el tipo de suelo, topografía, profundidad del nivel freático y población.
- Limitaciones económicas.
- Requerimientos a nivel local y nacional.

Como se menciona anteriormente, numerosas alternativas de remediación han demostrado ser eficaces en la limpieza de suelos contaminados, estas se pueden dividir en cuatro grupos según el tipo de tratamiento: físico, químico, biológico y térmico (Ver Tabla 7).

En el documento “Remediación de Suelos Contaminados con Hidrocarburos” se realizó el análisis de algunos métodos de remediación utilizados para el tratamiento de suelos y agua subterránea; a continuación se encuentra un resumen de éstos y algunas características importantes de cada uno (Ver Tabla 8), como lo son:

- El tipo de suelo a tratar, hablando específicamente de su permeabilidad. Los suelos en esta ocasión fueron clasificados como cohesivos (arcillas), los cuales presentan una baja permeabilidad y granulares (arenas) con una alta permeabilidad. La mayoría de tratamientos son más efectivos en suelos granulares ya que se facilita la corriente de aire, por ende la volatilización y degradación se obtienen más rápidamente.
- Los tipos de desechos que pueden ser tratados con una tecnología de remediación dada. La mayoría de las tecnologías presentadas tratan desechos orgánicos, aunque algunas como por ejemplo *capping*, *flushing*, *washing*, pueden ser utilizados para tratar compuestos inorgánicos, incluyendo metales.
- Los costos y tiempos de las diferentes alternativas de remediación del suelo, las cuales son altamente dependientes de las condiciones de sitio. En la Tabla 9 se muestran algunos rangos típicos de tiempo y costo para cada tecnología.

**Tabla 8.** Resumen Comparativo de las Tecnologías de Remediación.

Tecnología	Tipo de Suelo	Aplicación	Costo Relativo	Tiempo Relativo
Capping	Cohesivo-Granular	Compuestos Orgánicos, Inorgánicos y Radioactivos	Medio	Corto
Venting	Granular	Compuestos Orgánicos Volátiles	Bajo-Medio	Largo
Air Sparging	Granular	Compuestos Orgánicos Volátiles	Medio	Medio
Flushing	Granular	Compuestos Orgánicos e Inorgánicos	Medio-Alto	Corto-Medio
Biological Treatment	Granular	Compuestos Orgánicos	Bajo-Medio	Largo
Excavation	Cohesivo-Granular	Todo Tipo de Contaminantes	Medio-Alto	-
Washing	Granular	Compuestos Orgánicos e Inorgánicos	Muy Alto	-
Volatilization	Granular	Compuestos Orgánicos Volátiles	Muy Alto	Corto
Land Framing	Cohesivo-Granular	Compuestos Orgánicos Volátiles	Bajo-Medio	Largo



**Tabla 9.** Rangos Típicos de Tiempo y Costo para las Tecnologías de Remediación.

<b>Tecnología</b>	<b>Costo (\$)</b>	<b>Especificaciones</b>	<b>Tiempo (meses)</b>
Capping	220,000 - 1,200,000	por acre	1 - 4
Air Sparging	150,000 - 350,000	por acre	6 - 24
Venting	10 - 50	por yarda cúbica	6 - 60
Flushing	100 - 300	por yarda cúbica	4 - 9
Land Farming	30 - 70	por yarda cúbica	6 - 60
Biological Treatment	1 - 25	por libra de contaminante removido	6 - 60
Volatilization	10,000 - 20,000	costo fijo de movilización por yarda cúbica	3 - 6
	90 - 290	costo de operación por yarda cúbica	
Excavation	50 - 150	por yarda cúbica de suelo de disposición (*)	(f)
	150 - 300	por yarda cúbica de suelo de disposición (+)	
	500 - 2,000	por yarda cúbica de incineración de suelo (-)	
	5 - 20	por galón de incineración de líquidos peligrosos (-)	
Washing	10,000 - 20,000	costo fijo de movilización por yarda cúbica	(v)
	90 - 400	costo de operación por yarda cúbica	

(\*) Incluyendo transporte y disposición

(+) Incluyendo transporte, solidificación/estabilización, y disposición

(-) Incluyendo transporte, tratamiento off gas y manejo de cenizas

(f) Depende de las capacidades de la infraestructura del sitio para el manejo del contaminante

(v) Depende de la tasa de proceso de la unidad de tratamiento y del volumen de suelo. El proceso generalmente se realiza en una unidad móvil, la cual tiene un rendimiento de 20 a 200 yardas cúbicas por día.



## 2. REMEDIACIÓN DE UN SUELO CONTAMINADO CON GASOLINA

### 2.1 INTRODUCCIÓN

La implementación de un proyecto de remediación seguro y exitoso requiere una investigación detallada del sitio, específicamente de las propiedades del suelo y del contaminante, conociendo sus características físicas, químicas y biológicas; para así implementar la alternativa de remediación más efectiva en cuanto a costo y tiempo. El conocimiento de dichos parámetros se realiza por medio de ensayos de laboratorio, basados principalmente en las referencias [14] y [15] para la caracterización de suelo y contaminante, respectivamente.

Además se requiere un análisis riguroso utilizando, por ejemplo, prototipos a escala para evaluar las suposiciones a ser usadas en el diseño del sistema de remediación y determinar con precisión la respuesta del sistema. En este proyecto se utilizó un modelo físico experimental a escala diseñado y construido para evaluar la eficiencia de la remediación de suelos contaminados con gasolina. El mecanismo de remediación utilizado fue el de 'Extracción de Vapores del Suelo' (EVS o SVE).

El presente capítulo está basado en el estudio realizado previamente, el cual se encuentra en el documento "Descontaminación de Suelos por el Método *Soil Vapor Extraction*", si desea profundizar en el tema refiérase a éste.

### 2.2 CASO DE ESTUDIO

Según datos suministrados por Fendipetroleo Nacional actualmente en Colombia existen 2.150 estaciones de servicio públicas y 350 privadas, donde en promedio la demanda de combustible por estación de servicio es de 110 barriles diarios. Se ha establecido que cerca del 25% de las estaciones requieren servicios de recuperación de suelos y que en promedio tienen pérdidas de combustible cercanas al 0.1% del volumen total de los tanques de almacenamiento; además se estima que el 3% de la contaminación de suelos corresponde a la etapa de comercialización de hidrocarburos [11]. Partiendo de esto, se decidió estudiar un caso de contaminación cercano a una estación de gasolina, para así comprobar que tan grave es el problema de contaminación.

En la ciudad de Bogotá, se estaban realizando, en el segundo trimestre del año 2005, excavaciones poco profundas para la adecuación de vías por parte de la empresa Transmilenio. Aprovechando esta situación, se tomó una muestra de suelo a aproximadamente 2 m de profundidad, muy cerca a la desmantelación de unos tanques

subterráneos de una estación de servicio; este suelo presentaba un fuerte olor a gasolina, primer indicio de contaminación (Ver Figura 3).

El origen de esta posible contaminación en principio se supone que es producida por la estación de servicio, ya que esta se encontraba sobre el punto de muestreo; sin embargo no se cuenta con cifras exactas ya que este tipo de información es de carácter privado en las empresas petroleras y su publicación atenta en muchos casos en contra de su imagen pública. Es por esto que se realizara al contaminante presente en el suelo una caracterización específica por cromatografía gaseosa en el rango gasolina, igualmente al suelo una caracterización con dos muestras diferentes para de esta manera poder promediar los valores obtenidos para cada una de sus parámetros.



**Figura 3.** Muestra del Suelo en Estudio.

## 2.3 CARACTERIZACIÓN DEL SUELO

La caracterización de la muestra de suelo se realizó mediante ensayos básicos de humedad, gravedad específica, propiedades índice, contenido de materia orgánica, permeabilidad y granulometría; los cuales están documentados y realizados en base a las normas de la *American Society for Testing and Materials*.

### 2.3.1 Datos y Resultados

#### 2.3.1.1 Humedad natural

**Tabla 10.** Determinación de la Humedad Natural del Suelo en Estudio.

Muestra	Peso Lata	Peso Inicial	Peso Final	w (%)	w (%)
1	11.42	149.17	122.76	23.72	24.11
1	12.76	136.22	111.92	24.51	
2	12.31	115.19	94.72	24.84	24.99
2	12.25	107.12	88.06	25.14	
<b>Humedad Natural</b>					<b>24.55</b>

### 2.3.1.2 Límites

Los límites del suelo son humedades; estas son los límites de los diferentes comportamientos que puede tener el material.

#### Límite Líquido

El límite líquido es la humedad a la cual el suelo empieza a comportarse como un líquido, además corresponde a los 25 golpes interpolados de la regresión obtenida para tres puntos (de cada muestra) acotados con su respectiva humedad y número de golpes necesarios para cerrar la ranura, como se muestra en la Tabla 11 y en la Figura 4.

Tabla 11. Determinación del Límite Líquido del Suelo en Estudio.

Muestra	Peso Lata	Golpes	Peso Inicial	Peso Final	w (%)	LL
1	12.95	33	36.60	32.10	23.50	24.10
1	11.53	22	40.77	35.16	23.74	
1	13.00	12	46.88	39.88	26.04	
2	12.60	32	37.46	32.78	23.19	24.05
2	11.49	21	41.69	35.76	24.43	
2	13.03	11	46.33	39.43	26.14	
<b>Límite Líquido</b>						<b>24.08</b>

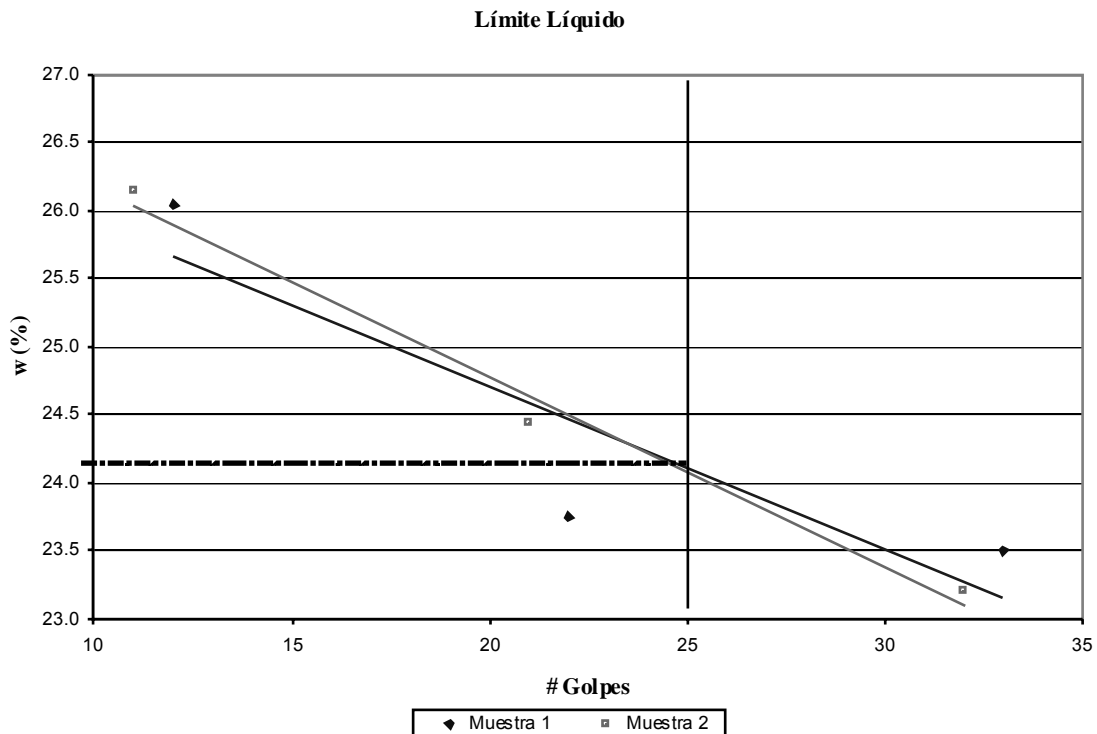


Figura 4. Determinación del Límite Líquido del Suelo en Estudio.

### Límite Plástico

El límite plástico es la humedad mínima a la cual el suelo se comporta plásticamente y corresponde a la humedad calculada de los rollitos de suelo agrietados (Ver Tabla 12).

Tabla 12. Determinación del Límite Plástico del Suelo en Estudio.

Muestra	Peso Lata	Peso Inicial	Peso final	w (%)	LP
1	13.21	20.46	19.57	13.99	13.98
1	13.11	20.37	19.48	13.97	
2	11.60	20.30	19.25	13.73	13.85
2	13.09	22.31	21.18	13.97	
<b>Límite Plástico</b>					<b>13.91</b>

### Índice Plástico

El índice plástico es la medida de la reacción de un suelo en presencia de agua y se calcula como la diferencia entre el límite líquido y el plástico, este corresponde al rango de humedades en el cuál el suelo presenta un comportamiento plástico (Ver Tabla 13).

Tabla 13. Determinación del Índice Plástico del Suelo en Estudio.

Muestra	LL	LP	IP
1	24.10	13.98	10.12
2	24.05	13.85	10.20
<b>Índice Plástico</b>			<b>10.16</b>

#### 2.3.1.3 Contenido de materia orgánica

El cálculo del contenido de materia orgánica (*MO*) de la muestra de suelo, se realiza utilizando la siguiente ecuación:

$$MO = \frac{A - B}{B - C} \times 100 \quad (13)$$

Donde *A* el peso del crisol con suelo antes de la ignición (inicial), *B* el peso del crisol con suelo después de la ignición (final) y *C* el peso del crisol. Los resultados obtenidos del contenido de materia orgánica, se encuentran en la Tabla 14.

Tabla 14. Determinación del Contenido de Materia Orgánica del Suelo en Estudio.

Muestra	Peso Crisol	Peso Inicial	Peso Final	MO (%)
1	22.30	36.21	35.88	2.43
2	23.68	37.49	37.14	2.60
<b>Contenido de Materia Orgánica</b>				<b>2.52</b>

#### 2.3.1.4 Gravedad específica

La gravedad específica ( $G_s$ ) da la medida de la densidad de los sólidos (Ver Tabla 15) presentes en la muestra y es un parámetro esencial para la obtención de diversas

relaciones que describen el estado natural de la masa de suelo. Experimentalmente se calcula a partir de la siguiente fórmula:

$$G_s = \frac{W_s}{(W_s + W_{fw} - W_{fsw})} \quad (14)$$

Donde  $W_s$  es el peso del suelo,  $W_{fw}$  el del picnómetro con agua y  $W_{fsw}$  el del picnómetro con agua y suelo.

**Tabla 15.** Determinación de la Gravedad Específica del Suelo en Estudio.

Muestra	Wfw	Wfsw	Ws	Gs
1	147.26	166.86	32.14	2.56
2	149.44	169.72	33.12	2.58
<b>Gravedad Específica</b>				<b>2.57</b>

### 2.3.1.5 Análisis granulométrico

El hidrómetro arroja la granulometría de la muestra, lo cual principalmente, nos suministra información del porcentaje de arcilla presente. Para la realización de los cálculos se utilizan las ecuaciones que se presentan a continuación.

La lectura del hidrómetro debe corregirse por los siguientes factores:

- Por Cero ( $C$ )

$$R = L \pm C \quad (15)$$

Donde  $C$  es el valor, positivo o negativo, que toma en cuenta las impurezas del agua y del agente dispersor y  $L$  es la lectura tomada del hidrómetro.

- Por Menisco ( $Cm$ )

$$R' = R + Cm \quad (16)$$

Donde  $Cm = 0.5$  g/L (hidrómetro 152 H) y  $R$  es la lectura corregida por cero.

- Por Temperatura ( $m$ )

$$m = 1000[0.99823 - \rho_w - 0.000025(T - 20)] \quad (17)$$

Donde  $T$  es la temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ) y  $\rho_w$  la densidad del agua ( $\text{g/cm}^3$ ). Esta corrección puede ser positiva o negativa dependiendo del valor de  $T$ .

- Por Agente dispersante

$$Cd = 0.001 \times Xd \times Vd \quad (18)$$

Donde  $Xd$  es la concentración del agente dispersivo (g/L) y  $Vd$  el volumen de la concentración (ml).

En este caso específico se tienen en cuenta los siguientes valores generales:

$$\begin{array}{ll}
 W_0 = 50 \text{ g/L} & T = 24 \text{ }^\circ\text{C} \\
 C_m = 0.5 \text{ g/L} & \rho_w = 0.99733 \text{ g/cm}^3 \\
 m = 0.8 \text{ g/L} & \eta = 0.00914 \text{ g/cm.s}
 \end{array}$$

$W_0$  y  $T$  fueron medidos en el laboratorio,  $C_m$  es un valor preestablecido para los hidrómetros 152 H como se menciona anteriormente,  $m$  fue calculado con la ecuación 17 y  $\rho_w$  y  $\eta$  son parámetros del agua a temperatura  $T$ .

El diámetro de una partícula se puede calcular según la ley de Stokes, utilizando la siguiente fórmula:

$$D = \sqrt{\frac{30\eta H_R}{981(G_s - 1)\rho_w t}} \quad (19)$$

Dónde  $t$  es el tiempo desde el inicio de la sedimentación (min),  $H_R$  la distancia de caída corregida,  $G_s$  la gravedad específica de las partículas de suelo y  $\eta$  la viscosidad (g/cm.s) y  $\rho_w$  la densidad (g/cm<sup>3</sup>) del agua a la temperatura  $T$  del ensayo.

La caída efectiva de las partículas para el hidrómetro 152 H se puede encontrar teniendo como base la lectura del hidrómetro en la tabla 2 de la Norma ASTM D 422 – 63.

El porcentaje de arcilla  $p$  es:

$$D = \frac{0.6226}{W_0} (R' - Cd + m) \frac{G_s}{G_s - 1} \times 100 \quad (20)$$

Dónde  $W_0$  es el peso seco de suelo por litro de suspensión.

Para la realización de los cálculos de la primera muestra (Ver Tabla 16 y Figura 5) se utilizó un  $G_s$  de 2.56 (valor obtenido por cálculos previos) y un  $Cd$  de 6 g/L (constante obtenida de la calibración del hidrómetro).

**Tabla 16.** Determinación de la Granulometría de la Muestra 1 del Suelo en Estudio.

Tiempo min	lectura g/L	R' g/L	Hr cm	D partícula mm	p %
1	33.0	33.5	10.80	0.0440	57.79
2	30.0	30.5	11.30	0.0318	51.66
5	25.0	25.5	12.10	0.0208	41.45
10	23.0	23.5	12.45	0.0149	37.37
15	22.0	22.5	12.60	0.0123	35.32
30	20.0	20.5	12.95	0.0088	31.24
60	19.0	19.5	13.10	0.0063	29.20
250	17.0	17.5	13.40	0.0031	25.12
1440	12.0	12.5	14.25	0.0013	14.91

Los valores de Hr fueron tomados de la tabla 2 de la Norma ASTM D 422 – 63.



En el análisis de la segunda muestra se utilizó un  $G_s$  de 2.58 y un  $C_d$  de 5 g/L. A partir de esto se obtuvo la Tabla 17 y la Figura 5.

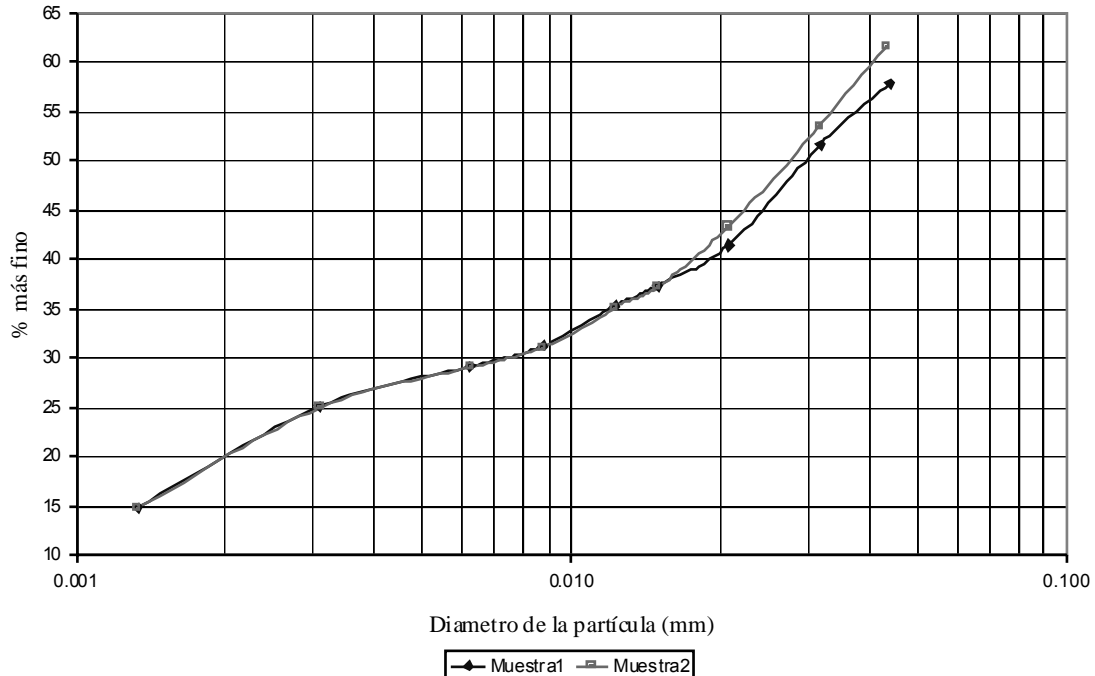
**Tabla 17.** Determinación de la Granulometría de la Muestra 2 del Suelo en Estudio.

Tiempo min	lectura g/L	R' g/L	Hr cm	D partícula mm	p %
1	34.0	34.5	10.60	0.0434	61.62
2	30.0	30.5	11.30	0.0317	53.48
5	25.0	25.5	12.10	0.0207	43.32
10	22.0	22.5	12.60	0.0150	37.21
15	21.0	21.5	12.80	0.0123	35.18
30	19.0	19.5	13.10	0.0088	31.11
60	18.0	18.5	13.25	0.0063	29.08
250	16.0	16.5	13.60	0.0031	25.01
1440	11.0	11.5	14.40	0.0013	14.85

Los valores de Hr fueron tomados de la tabla 2 de la Norma ASTM D 422 – 63.

Finalmente se graficó el diámetro de la partícula contra el porcentaje de arcilla para cada una de las muestras como se muestra a continuación:

**Granulometría por Hidrómetro**



**Figura 5.** Determinación de la Granulometría del Suelo en Estudio.

Si las partículas de arcilla son aquellas de diámetro inferior a 2  $\mu\text{m}$ , entonces el porcentaje de arcilla del suelo se obtiene de la Figura 5 y es el que se muestra en la Tabla 18.

**Tabla 18.** Determinación del Porcentaje de Arcilla del Suelo en Estudio.

Muestra	% Arcilla
1	20.0%
2	20.0%
<b>Porcentaje de Arcilla</b>	<b>20.0%</b>

El rango de diámetros estimado de la distribución granulométrica, en este caso, se encuentra desde el tamiz No. 200 (0.075 mm) hasta el 0.001 mm, ya que el suelo tiene partículas muy finas. Se realizó entonces a la muestra, un lavado sobre el tamiz No. 200 después de haber efectuado el análisis granulométrico por hidrómetro y se obtuvieron los resultados que se muestran en la Tabla 19, para conocer el porcentaje de suelo que se encontraba fuera del rango establecido.

**Tabla 19.** Determinación del Porcentaje Retenido en el Tamiz No. 200 del Suelo en Estudio.

Muestra	Peso Inicial	Peso Final	% Retenido
1	50.00	14.94	29.88
2	50.00	13.11	26.22
<b>% Retenido</b>			<b>28.05</b>

### 2.3.1.6 Permeabilidad

La permeabilidad es una propiedad del suelo que indica la facilidad con la que el agua fluye a través del suelo; de manera general, entre más contacto haya entre el fluido y la superficie de los poros, más baja es la permeabilidad. El grado de permeabilidad de un suelo se determina mediante la aplicación de la ley de Darcy, así:

$$k = \frac{v}{i} = \frac{M_w \times H}{A \times t \times L} \quad (21)$$

La ecuación anterior es caracterizada por el coeficiente de permeabilidad ( $k$ ), el cual se define como la tasa de descarga de agua bajo condiciones de flujo laminar a través del área transversal del suelo sujeto a un gradiente hidráulico ( $i$ ).

$$v = \frac{Q}{A} = \frac{V}{A \times t} = \frac{M_w}{A \times t} \quad (22) \quad i = \frac{L}{H} \quad (23)$$

Donde  $v$  es la velocidad de descarga,  $L$  la pérdida de cabeza total,  $H$  la altura y  $A$  el área transversal de la muestra,  $Q$  el caudal,  $V$  el volumen y  $M_w$  el peso de agua que pasa a través de la columna de suelo en un intervalo de tiempo  $t$  ( $V$  y  $M_w$  son equivalentes ya que la densidad del agua es 1).

Para poder realizar el ensayo de permeabilidad fue necesario determinar a que densidad se encontraba la muestra de suelo, para garantizar que el material en el permeámetro tuviera las mismas características que la muestra original. Para determinar la densidad, se pesó un trozo de suelo, se parafinó y registró el peso, se introdujo en una probeta con un volumen de agua conocido obteniendo así el volumen desplazado por el trozo de



suelo parafinado. Finalmente, por medio de algunos cálculos básicos se obtuvo la densidad del suelo. Conociendo la densidad del suelo y las dimensiones del permeámetro (altura y diámetro) se consiguió el peso de suelo necesario para llenar el molde. La Tabla 20 resume el proceso descrito anteriormente.

**Tabla 20.** Determinación de la Densidad del Suelo en Estudio.

Material	Peso gr	Volumen cm <sup>3</sup>	Densidad gr/cm <sup>3</sup>
Parafina	13.58	13.86	0.98
Suelo + Parafina	133.93	76.00	1.76
Suelo	120.35	62.14	<b>1.94</b>

La densidad de la parafina es un valor conocido. El peso del suelo, del suelo con parafina y el volumen de éste último, fueron medidos en el laboratorio. El peso de la parafina se obtuvo de la diferencia entre el peso del suelo con parafina y el del suelo y el volumen del suelo de la diferencia entre el volumen del suelo con parafina y el de la parafina. El resto de valores (volumen de la parafina y densidades del suelo con parafina y del suelo) fueron calculados por medio de la ecuación 24.

$$Densidad = \frac{Peso}{Volumen} \quad (24)$$

Teniendo la densidad del suelo y las dimensiones del molde se obtuvo el volumen del mismo y el peso necesario de suelo así:

$$\begin{aligned} H &= 11.65 \text{ cm} & V &= 935.23 \text{ cm}^3 \\ D &= 10.11 \text{ cm} & W &= 1811.23 \text{ gr} \end{aligned}$$

Para la determinación de la permeabilidad de la muestra de suelo se utilizó una cabeza hidráulica (L) de 1000 cm, obteniendo los siguientes resultados (Ver Tabla 21):

**Tabla 21.** Determinación de la Permeabilidad del Suelo en Estudio.

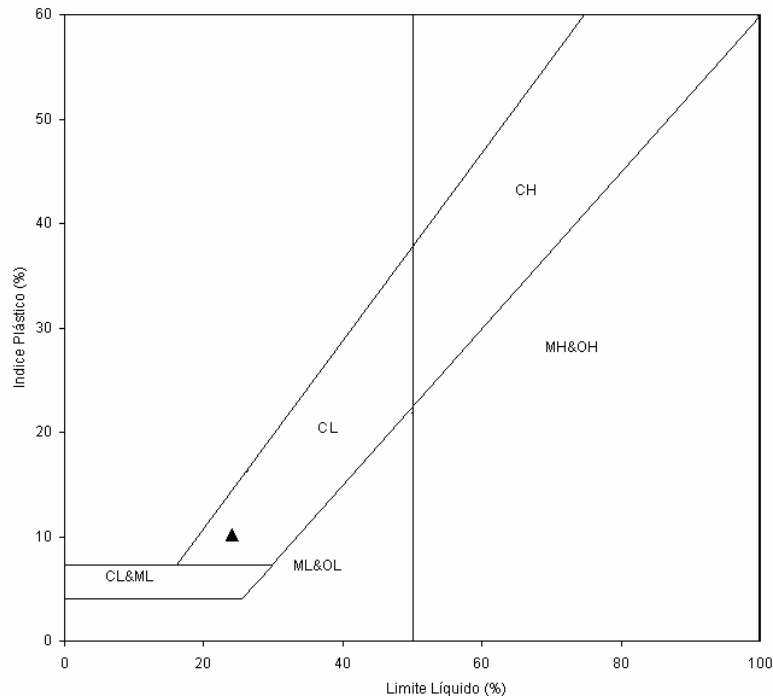
Punto	t (s)	V (ml)	ΔV (ml)	Mw (g)	i	v (cm/s)	k (cm/s)
1	1200	5.2	5.2	5.2	85.84	5.40E-05	6.3E-07
2	1200	10.5	5.3	5.3	85.84	5.50E-05	6.4E-07
3	1200	17.4	6.9	6.9	85.84	7.16E-05	8.3E-07
4	1200	22.5	5.1	5.1	85.84	5.29E-05	6.2E-07
<b>Permeabilidad</b>							<b>5.44E-07</b>

### 2.3.2 Clasificación del Suelo

Después de la realización y análisis de los diferentes ensayos descritos anteriormente, el suelo en estudio presenta las siguientes características:

<b>Humedad Natural</b>	24.55 %	<b>Gravedad Específica</b>	2.57
<b>Límite Líquido</b>	24.08 %	<b>Porcentaje Retenido</b>	28.05 %
<b>Límite Plástico</b>	13.91 %	<b>Porcentaje de Arcilla</b>	20.00 %
<b>Índice Plástico</b>	10.16 %	<b>Densidad</b>	1.94 gr/cm <sup>3</sup>
<b>Contenido de MO</b>	2.52 %	<b>Permeabilidad</b>	5.44E-07 cm/s

En base al sistema de clasificación unificado (ASTM D 2487-69) el suelo se analiza así:



**Figura 6.** Carta de Plasticidad.

Tomado de Bardet, 1997.

- Más del 50% pasa por el tamiz No. 200 (71.95%), se clasifica como un suelo de granos finos.
- El límite líquido es inferior a 50% (24.08%), se clasifica como un limo o arcilla de baja plasticidad.
- Con el límite líquido (24.08%) y el índice plástico (10.16%) en la carta de plasticidad (Ver Figura 6) se clasifica como **CL** (Arcillas inorgánicas de plasticidad baja a media, arcillas gravosas, arenosas ò limosas, suelos sin mucha arcilla).

Es necesario tener en cuenta que el suelo caracterizado es una mezcla de arcilla pura con recebo, esto se debe a que la muestra recolectada se encontraba bajo una estación de servicio, por ende se encontraban residuos de la “cimentación” de la estación.

Por otra parte, el valor de permeabilidad obtenido pudo verse afectado, ya que el ensayo se realizó en un molde de pared rígida lo cual propicia que el agua fluya más rápido en las paredes, sin embargo con un valor de permeabilidad en el rango de  $10^{-7}$ , la muestra se clasifica también como un limo por lo que podría decirse que el suelo es una arcilla limosa. Además, la obtención del límite líquido y el límite plástico es un procedimiento muy rudimentario y subjetivo, ya que los parámetros que determinan estas humedades

no son fácilmente determinables y están expuestos a la influencia de diversas variables ambientales como la temperatura.

## 2.4 CARACTERIZACIÓN DEL CONTAMINANTE

La caracterización del contaminante presente en la muestra de suelo se realizó mediante cromatografía gaseosa (GC), metodología documentada y realizada en base a las normas de la *U.S. Environmental Protection Agency*.

### 2.4.1 Datos y Resultados

La GC determina la concentración de varios compuestos orgánicos volátiles y semivolátiles no halogenados, usando un programa de temperaturas para separar los compuestos orgánicos. Para poder realizar el ensayo es necesario efectuar la calibración del equipo, con esto se obtiene los niveles mínimos de detección (NMD) del dispositivo, es decir los niveles mínimos de cada compuesto que el aparato puede registrar.

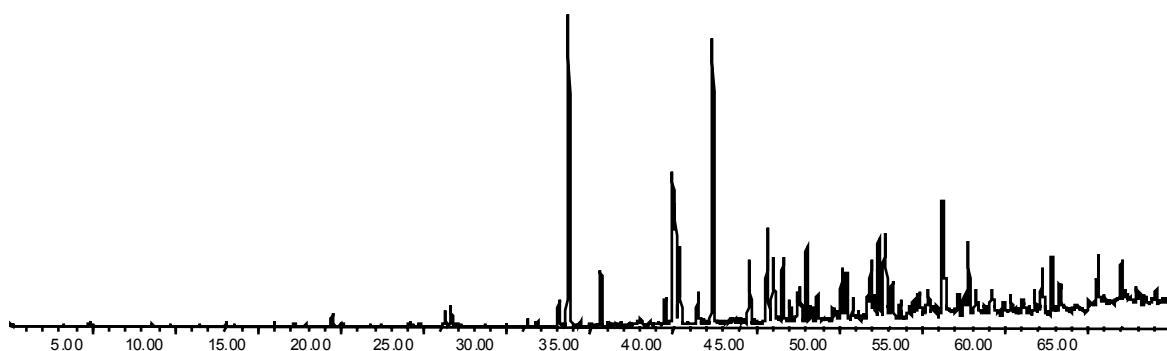


Figura 7. Cromatograma de la Muestra Inicial del Suelo en Estudio.

Tabla 22. Compuestos Presentes en la Muestra Inicial del Suelo en Estudio.

Compuesto	mg/Kg
Tolueno	3.03
Etilbenceno	0.12
M+p-Xileno	13.92
o-Xileno	0.87
n-Propilbenceno	0.26
1,2,3-Trimetilbenceno	0.12
1,3,5-Trimetilbenceno	5.02
Naftaleno	0.13
<b>TOTAL VOCs</b>	<b>23.47</b>
<b>TPH-GRO</b>	<b>56.24</b>

Después de la realización y análisis de la GC, el suelo en estudio presenta el anterior cromatograma con diferentes compuestos (Hidrocarburos totales de petróleo (TPH) y



Compuestos orgánicos volátiles aromáticos (BTEX)) a las respectivas concentraciones (Ver Figura 7 y Tabla 22).

## 2.4.2 Clasificación del Contaminante

**Tabla 23.** Comparación entre las Concentraciones Permitidas y las Encontradas en la Muestra Inicial.

CARACTERÍSTICAS	Arcillo - Limoso	Muestra Inicial
Concentración (BTEX - ppm)	Benceno = 0.5 Tolueno = 0.5 Etil-benceno= 1 Xileno= 1	Benceno = 5.4 Tolueno = 3.03 Etil-benceno= 0.12 Xileno= 14.79
Concentración gasolina (HTP - ppm)	1	56.24

La normatividad en Colombia en cuanto a la contaminación con hidrocarburos de los suelos arcillo limosos, utiliza los estándares mostrados anteriormente en la Tabla 6.

Comparando estos valores con los encontrados en la muestra inicial de suelo, se puede ver que el suelo en estudio presento un alto grado de contaminación específicamente con gasolina (56.24 ppm) (Ver Tabla 23). Para el benceno se tomaron en cuenta el n-Propilbenceno, 1,2,3-Trimetilbenceno y 1,3,5-Trimetilbenceno y para el xileno el M+p-Xileno y o-Xileno.

## 2.5 MODELO DE REMEDIACIÓN

Esta sección toma como referencia principal el trabajo realizado por la ingeniera Maria Angélica Echevarria, el cual se encuentra documentado su tesis “Modelo de Remediación de Subsuelos Contaminados con Gasolina”, si desea profundizar en el tema refiérase a éste.

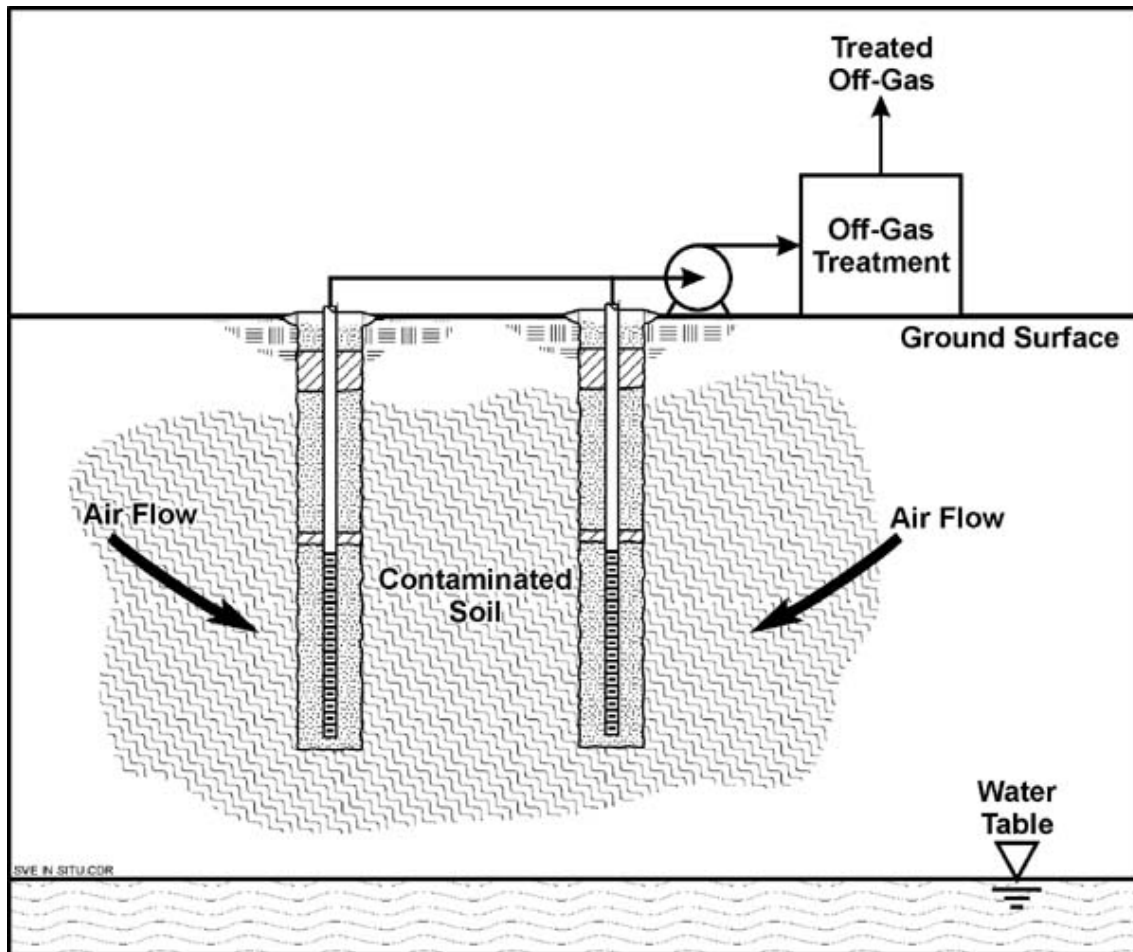
### 2.5.1 Método de Remediación

#### 2.5.1.1 Sistema de EVS

La extracción de vapores del suelo ó *soil vapor extration* (EVS ó SVE) es un sistema de remediación que se utiliza para remover compuestos orgánicos de la zona no saturada (vadosa) de la matriz de suelo. El proceso de SVE consiste en crear una corriente de succión en el suelo para transferir los contaminantes en fase de vapor presentes en el suelo hacia la corriente de succión (Echevarría, 2005). El proceso incluye un sistema para el manejo de gases, lo anterior para recuperar o destruir los contaminantes (Ver Figura 8).

El sistema SVE se implementa instalando pozos de extracción de vapor en la zona contaminada, los cuales inducen el movimiento de los gases en el suelo, por medio de

succión. Pozos de extracción verticales se utilizan a profundidades mayores a 1.5 m (5 ft) y han tenido éxito a profundidades hasta de 91 m (300 ft).



**Figura 8.** Diagrama Esquemático del *Soil Vapor Extration*.

*Tomado de Remediation Technologies.*

La tecnología es mucho más eficaz en suelos granulares con bajo contenido de arcilla y se utiliza para el tratamiento de compuestos orgánicos volátiles. El tratamiento por SVE tiene un costo de \$20/\$30 a \$60 por yarda cúbica. El rango estimado de costo incluye, la instalación de la(s) bomba(s), del pozo de extracción, del punto de monitoreo y del sistema de tratamiento de gases; además de la excavación del suelo (si es necesario) y de la operación y monitoreo.

La remediación total de un sitio utilizando la tecnología SVE tiene una duración de 6 a 12 meses y de 4 a 6 meses de operación y mantenimiento; sin embargo, este rango de tiempo depende de las metas de limpieza propuestas, además de otras condiciones como el volumen de suelo a tratar, concentración, distribución, solubilidad y volatilidad de los VOCs en el suelo y las características del sitio.

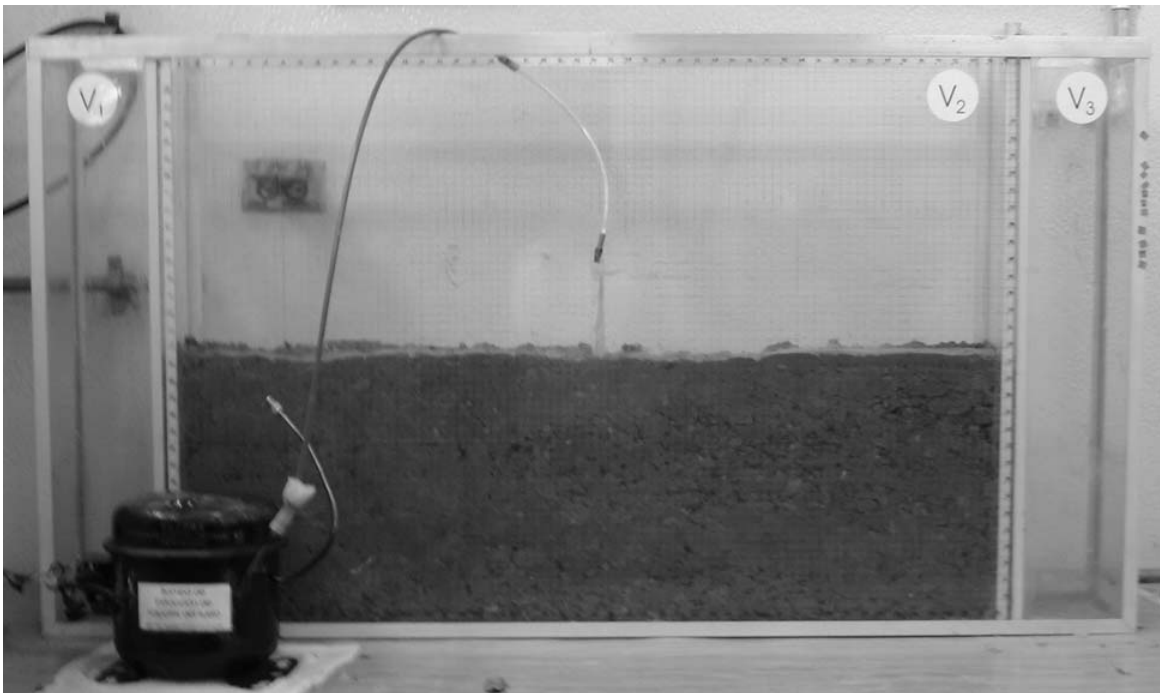
La principal desventaja del sistema SVE se presenta en la remediación de suelos con baja permeabilidad (arcilla), secos y alto contenido de materia orgánica ya que inhiben la volatilización y tienen un alta capacidad de adsorción, donde los contaminantes

tengan baja presión de vapor. Otros factores que pueden limitar la aplicabilidad y la eficacia del proceso son las emisiones, la heterogeneidad, la presencia de nivel freático

### 2.5.1.2 Modelo del sistema de EVS

El modelo de remediación a escala utilizado, fue diseñado y construido por la ingeniera Maria Angélica Echevarria para evaluar la eficiencia de la remediación de suelos y acuíferos contaminados con gasolina.

El equipo para la simulación de un acuífero en 2D utilizado en este experimento se muestra en la Figura 9.



**Figura 9.** Equipo de Simulación de la Remediación de un Acuífero en 2D.

#### **Acuífero**

Las dimensiones del tanque son 100 cm de largo, 70 cm de alto y 15 cm de ancho. El interior del tanque está dividido en tres compartimientos, una cámara de suelo (V2) de 70 cm de largo, la cual contiene el escenario de remediación, centrada en el tanque y confinada por dos depósitos de agua “subterránea” (V1 y V3), cada uno de 15 cm de longitud.

#### **Sistema de Extracción de Vapores**

El sistema de extracción de vapores está compuesto por un pozo y una bomba de extracción de aire. La bomba es una ‘unidad de enfriamiento’ utilizada en el ensamble de neveras; el pozo es un tubo de aluminio ( $d = 3/8''$ ) perforado, éste tiene incorporado un sistema de aislamiento hecho en material de algodón sintético (huata) que evita la intrusión de partículas finas de suelo al pozo y su paso hacia la bomba.



## Suelo

El suelo utilizado en el modelo fue una arcilla inorgánica de plasticidad baja a media, la cual fue caracterizada y descrita anteriormente (Ver Figura 3). Sin embargo, bajo las condiciones de la prueba, algunos parámetros importantes del suelo (permeabilidad) cambiaron; para conocerlos fue necesario determinar la densidad a la que éste se encontraba en el modelo físico.

Determinada la densidad, se obtiene la cantidad precisa de material para simular en el permeámetro (molde) las características de la muestra (Ver Tabla 24).

**Tabla 24.** Determinación del Peso del Suelo en Estudio.

Equipo	Peso gr	Volumen cm <sup>3</sup>	Densidad gr/cm <sup>3</sup>
Modelo	91598.73	49500.00	1.85
Molde	<b>1730.62</b>	935.23	1.85

El volumen del molde y del modelo son valores conocidos por cálculos previos y datos suministrados, respectivamente. El peso del suelo en el modelo, fue medido en el laboratorio. La densidad del suelo en el modelo es igual a la del suelo en el molde y fue calculada por medio de la ecuación 24. Teniendo la densidad y el volumen del suelo del molde se obtuvo el peso del mismo.

**Tabla 25.** Determinación de la Permeabilidad del Suelo en Estudio en el Modelo.

Punto	t (s)	V (ml)	Mw (g)	i	v (cm/s)	k (cm/s)
1	1200	8.2	8.2	14.33	8.51E-05	5.9E-06
2	1200	16.3	16.3	14.33	1.69E-04	1.2E-05
3	1200	24.6	24.6	14.33	2.55E-04	1.8E-05
4	1200	32.6	32.6	14.33	3.38E-04	2.4E-05
<b>Permeabilidad</b>						<b>1.18E-05</b>

Para la determinación de la permeabilidad (Ver Tabla 25) se utilizó una cabeza hidráulica (L) de 1000 cm y el mismo molde del ensayo anterior, por consiguiente los cálculos realizados tienen como base las dimensiones equivalentes (diámetro y altura).

La permeabilidad del suelo original es mucho menor a la del suelo en el modelo físico, este parámetro varía de  $5.4 \times 10^{-7}$  a  $1.2 \times 10^{-5}$ , por el contrario la densidad es mayor, esta varía de  $1.94 \text{ gr/cm}^3$  a  $1.85 \text{ gr/cm}^3$ .

## Contaminante

Para la investigación fue utilizada gasolina, compuesto hidrocarburo de baja densidad (LNAPL), su caracterización específica fue descrita anteriormente. La gasolina corriente, tiene una constante de la ley de Henry que varía entre  $1.8 \times 10^{-4}$  y 3.3, una densidad entre  $0.72$  y  $0.78 \text{ g/cm}^3$ , una presión de vapor entre 55 y 100 KPa aproximadamente, todas a  $20^\circ\text{C}$  y una gravedad específica en vapor 3 ó 4 veces la del aire.

### Montaje

La arcilla contaminada con gasolina, en ausencia de agua freática, fue colocada en el equipo hasta completar 33 cm de altura, la masa y volumen de suelo colocado fueron registrados para calcular su densidad. Después de que el suelo fue puesto en su lugar, el pozo de EVS fue introducido para comenzar la extracción de aire.

El procedimiento experimental se llevo a cabo por medio de ciclos de extracción de vapor, diariamente la bomba succionaba los vapores generados de 9 a 11 de la mañana y de 12 del día a 2 de la tarde; la remediación se realizó durante 30 días, incluyendo fines de semana.

### 2.5.1.3 Resultados

Después de realizar la simulación de un escenario de remediación de un contaminante ligero como lo es la gasolina, en una matriz conformada por un material arcilloso de media a baja plasticidad y al finalizar el ciclo de remediación se obtuvo el siguiente cromatograma con diferentes compuestos (Hidrocarburos totales de petróleo (TPH) y Compuestos orgánicos volátiles aromáticos (BTEX)) a las respectivas concentraciones (Ver Figura 10 y Tabla 26):

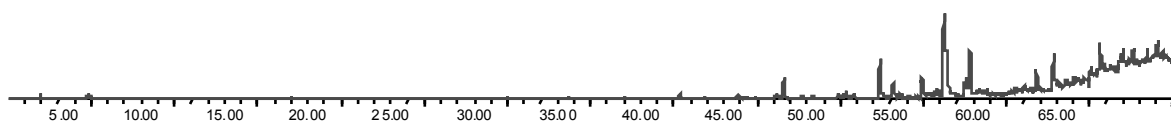


Figura 10. Cromatograma de la Muestra Final del Suelo en Estudio.

Tabla 26. Compuestos Presentes en la Muestra Final del Suelo en Estudio.

Compuesto	mg/Kg
Tolueno	N.D.
Etilbenceno	N.D.
M+p-Xileno	N.D.
o-Xileno	N.D.
n-Propilbenceno	N.D.
1,2,3-Trimetilbenceno	N.D.
1,3,5-Trimetilbenceno	N.D.
Naftaleno	0.10
<b>TOTAL VOCs</b>	<b>0.10</b>
<b>TPH-GRO</b>	<b>1.25</b>

Donde N.D. se refiere a que la concentración de ese compuesto no se puede determinar ya que se encuentra bajo el NMD del equipo. Se observa que el único compuesto que persiste (es detectable por el equipo) en la muestra de suelo es el naftaleno.

Comparando los valores máximos permitidos de concentración con los encontrados en la muestra final de suelo, se puede ver que el suelo en estudio presentó un bajo grado de contaminación con gasolina (1.25 ppm) (Ver Tabla 27).

**Tabla 27.** Comparación entre las Concentraciones Permitidas y las Encontradas en la Muestra Final.

CARACTERÍSTICAS	Arcillo - Limoso	Muestra Final
Concentración (BTEX - ppm)	Benceno = 0.5 Tolueno = 0.5 Etil-benceno = 1 Xileno = 1	Benceno = 0.003 Tolueno = 0.005 Etil-benceno = 0.005 Xileno = 0.01
Concentración gasolina (HTP - ppm)	1	1.25

Teniendo los valores de la muestra inicial (día 0) y la final (día 30) se puede obtener el porcentaje de descontaminación que sufrió el suelo en estudio durante el ciclo de remediación como se muestra a continuación (Ver Tabla 28). Es necesario tener en cuenta que ambas muestras fueron tomadas bajo el pozo de extracción a la misma altura, por lo cual ambas muestras se consideran equivalentes.

**Tabla 28.** Porcentaje de Descontaminación del Suelo en Estudio.

Compuesto	No1	No2	NMD	% Descontaminación
Tolueno	3.03	N.D.	0.005	99.83%
Etilbenceno	0.12	N.D.	0.005	95.83%
M+p-Xileno	13.92	N.D.	0.005	99.96%
o-Xileno	0.87	N.D.	0.005	99.43%
n-Propilbenceno	0.26	N.D.	0.001	99.62%
1,2,3-Trimetilbenceno	0.12	N.D.	0.001	99.17%
1,3,5-Trimetilbenceno	5.02	N.D.	0.001	99.98%
Naftaleno	0.13	0.1	0.001	23.08%
<b>TOTAL VOCs</b>	<b>23.47</b>	<b>0.1</b>		<b>99.57%</b>
<b>TPH-GRO</b>	<b>56.24</b>	<b>1.25</b>		<b>97.78%</b>

NMD (Niveles Mínimos de Detección)

N.D. (No Detectable)

El porcentaje de descontaminación se obtiene de la siguiente manera:

$$\%.Desct = \left( 1 - \frac{Conct.Final}{Conct.Inicial} \right) \times 100 \quad (25)$$

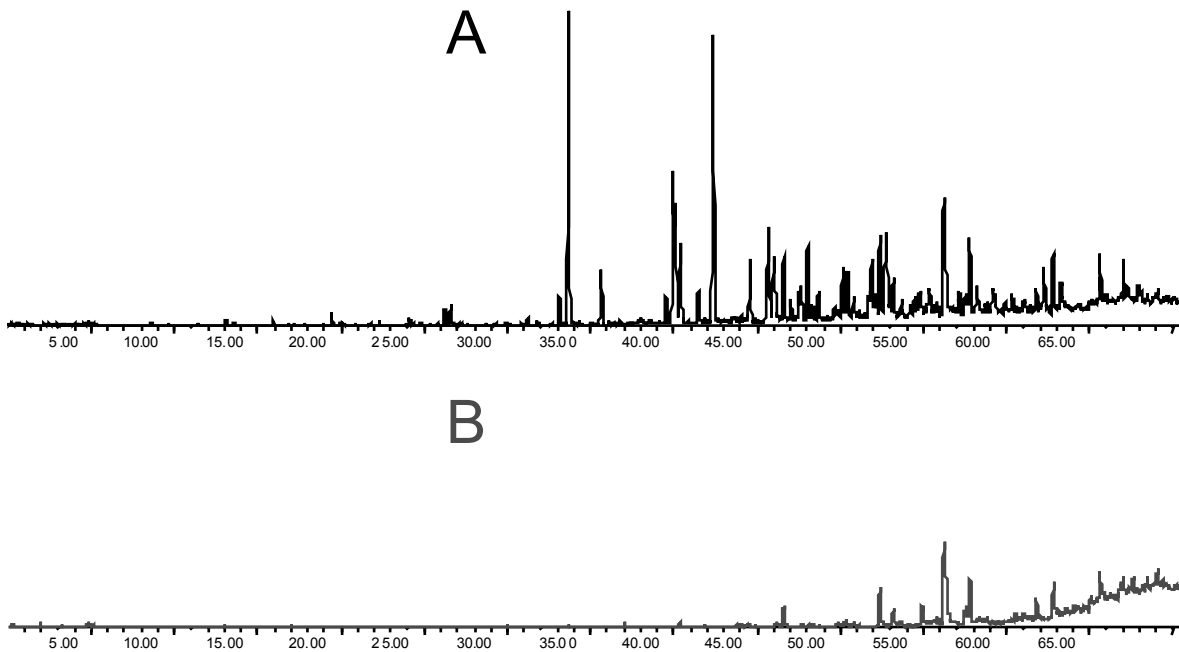
Como la concentración final de la mayoría de los compuestos no fue detectada, se sacó el porcentaje con la concentración final máxima posible es decir el NMD. La remediación del suelo puede decirse que fue un éxito ya que el benceno, tolueno y xileno tuvieron una descontaminación superior al 99% y el etilbenceno al 95%. El único



compuesto que tuvo un bajo porcentaje, fue el naftaleno ya que este es menos volátil por lo tanto más difícil de remediar.

El xileno y el benceno eran los compuestos orgánicos dominantes, las características químicas del benceno, tales como su alta volatilidad, facilitaron su remoción; esto sugiere que el tipo de contaminante afecta la eficacia del SVE.

Por medio de los cromatogramas es más fácil identificar el nivel de remediación como se muestra en la Figura 11, donde A es la Muestra No.1 ó inicial y B es la No. 2 ó final.



**Figura 11.** Comparación de los Cromatogramas Inicial y Final.



### 3. MODELOS THM

#### 3.1 INTRODUCCIÓN

Por varios años, se ha investigando sobre los problemas de la influencia de la temperatura en el comportamiento hidromecánico de medios porosos. Una gran atención se centra en el manejo de desechos radioactivos de la industria nuclear, ya que actualmente es un tema ambiental importante; la viabilidad de la disposición de desechos nucleares en formaciones geológicas profundas como posible solución esta siendo estudiada. Depósitos de producción de hidrocarburos o gas inducen también variaciones en tiempo y espacio, de presión en el depósito, saturación y temperatura, así como cambios en las propiedades del depósito térmicas e hidráulicas las cuales pueden causar una modificación del estado de esfuerzos en los alrededores del depósito; siendo este un problema más cercano a nosotros y posible a tratar en Colombia.

El propósito de todos los estudios realizados en torno a este tema es el de conocer la influencia de los modelos constitutivos en el comportamiento Termo-Hidro-Mecánico (THM) del suelo, analizando los efectos de temperatura e hidratación o secado en el comportamiento de cambio de volumen, permeabilidad y características de retención de agua, ante una variedad de trayectorias de esfuerzo y temperatura.

#### 3.2 MARCO TEÓRICO

En Europa se encuentran muy interesados en el tema de la viabilidad de depósitos subterráneos para la disposición de desechos nucleares, este tema ha sido estudiado por el gobierno francés, la ANDRA (Agencia francesa para el manejo de desechos radioactivos), instituciones de investigación como el SCK.CEN en Bélgica, el Ministero de Istruzione, dell'Università e della Ricerca en Italia y el CIEMAT en España. Gracias a estos estudios realizados, se tiene conocimiento de la siguiente información general sobre el tema. Esta sección toma como referencia principal el trabajo documentado en "Poromechanics II", si desea profundizar en el tema refiérase a éste.

##### 3.2.1 Ecuaciones Constitutivas

Modelar el comportamiento Termo-Hidro-Mecánico de un medio es muy complejo y la dificultad aumenta cuando se considera un medio no saturado. Las ecuaciones constitutivas que representan lo anterior, se presentan a continuación, donde el subíndice *lq*, *as*, *vp* y *g* indica líquido, aire seco, vapor y gas, respectivamente.

La presión del agua y la del gas están relacionadas a través de la presión capilar  $p_c$ , la cual es determinada experimentalmente de la saturación del agua:

$$\begin{aligned} p_c &= p_g - p_{lq} \\ p_g &= p_{as} + p_{vp} \end{aligned} \quad (26)$$

- Ecuación de balance de momento para el aspecto mecánico:

$$Div(\sigma) + rF^m = 0 \quad (27)$$

Donde  $r$  es la densidad promedio del medio y  $F^m$  las fuerzas masicas.

- La ley constitutiva:

$$d\sigma = L(d\varepsilon) - 3\alpha_o K_o dT - b(dp_g - S(p_c)dp_c) \quad (28)$$

Donde  $b$  es el coeficiente de Biot,  $L$  una función que depende del modelo mecánico,  $K_o$  el módulo de compresibilidad drenado,  $\alpha_o$  el coeficiente térmico de dilatación y  $\sigma$  el esfuerzo total que depende de los esfuerzos efectivos ( $\sigma'$ ) y la presión unitaria ( $\sigma_p$ ):

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma' + \sigma_p \cdot 1 \\ d\sigma_p &= -b(dp_g - Sdp_c) \end{aligned} \quad (29)$$

- Ecuación de conservación de masa:

$$\begin{aligned} m_{lq} + Div(M_{lq}) &= 0 \\ m_{as} + Div(M_{as}) &= 0 \end{aligned} \quad (30)$$

Donde  $m_i$  es el contenido de masa y  $M_i$  el flujo de la fase  $i$ ,  $i = (lq, as)$ . Se tienen que expresar ecuaciones de flujo para el agua y el aire (dos leyes de Darcy).

$$\begin{aligned} \frac{M_{lq}}{\rho_{lq}} &= \lambda_{lq}^H (-\nabla p_{lq} + \rho_{lq} F^m) \\ \frac{M_g}{\rho_g} &= \lambda_g^H (-\nabla p_g + \rho_g F^m) \end{aligned} \quad (31)$$

La conductividad hidráulica  $\lambda_i^H$  es función de la saturación  $\lambda_{lq}^H = \frac{K^{int} kr_i(S_{lq})}{\mu_i}$   $i=(lq, g)$ .

Donde  $kr_i$  es la permeabilidad relativa de la fase  $i$ ,  $K^{int}$  la permeabilidad intrínseca del medio poroso y  $\mu_i$  la viscosidad de la fase  $i$ .

La difusión de Fick esta dada por:

$$\frac{M_{vp}}{\rho_{vp}} - \frac{M_{as}}{\rho_{as}} = -F \nabla \left( \frac{\rho_{vp}}{\rho_g} \right) \quad (32)$$

Donde  $F$  es el coeficiente de Fick.

- Ecuación de conservación de energía para el aspecto térmico:

$$\begin{aligned} & h_{lq}^m \dot{m}_{lq} + h_{vp}^m \dot{m}_{vp} + h_{as}^m \dot{m}_{as} + \dot{Q}' + Div(h_{lq}^m M_{lq} + h_{vp}^m M_{vp} + h_{as}^m M_{as}) + Div(q) \\ & = (M_{lq} + M_{vp} + M_{as}) F^m + \Theta \end{aligned} \quad (33)$$

Donde  $h_{lq}^m$ ,  $h_{vp}^m$ ,  $h_{as}^m$  son las entalpías masicas de agua, vapor y aire seco y  $Q'$  la fuente de calor interna. El equilibrio entre agua y vapor esta dada por la siguiente relación:

$$g_{vp}^m = g_{lp}^m \quad (34)$$

Donde  $g_i^m$  es la entalpía libre de la fase  $i$ .

- Ecuación de flujo del calor (ley de Fourier).

$$q = -\lambda^T \cdot \nabla T \quad (35)$$

### 3.2.1.1 Modelo termo-hidráulico

El modelo se compone de tres ecuaciones de balance, donde el subíndice  $s$ ,  $w$ ,  $g$ ,  $v$  y  $a$  indica sólido, agua líquida, gas, vapor y aire seco, respectivamente.

- Conservación de masa de agua:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_w \theta_w + \rho_v (\omega - \theta_w)] = -div[\rho_w v_w + \rho_v v_g + j_v] + Q_w + Q_v \quad (36)$$

- Conservación de masa de aire:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho_a (\omega - \theta_w)] = -div[\rho_a v_g + j_a] + Q_a \quad (37)$$

- Conservación de energía:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} [h_w \rho_w \theta_w + h_v \rho_v (\omega - \theta_w) + h_a \rho_a (\omega - \theta_w) + h_s \rho_s (1 - \omega)] \\ & = Q - divq - div[h_w \rho_w v_w + h_v \rho_v v_g + h_v j_v + h_a j_a] \end{aligned} \quad (38)$$

Donde  $\omega$  es la porosidad,  $\rho$  la densidad,  $j$  el flujo difusivo de Fick,  $v$  el flujo de Darcy generalizado,  $h$  la entalpía específica,  $Q_i$  un término de fuente,  $Q$  la fuente de calor,  $q$  el flujo de conducción térmico.

Asumiendo los gases como perfectos y utilizando la ley de Kelvin para describir el cociente entre la presión de vapor y la presión de vapor saturado.

$$\begin{aligned}\rho_v &= RH\rho_v^o \\ RH &= \text{Min}\left(\exp\left(\frac{M_v g \psi}{RT}\right); 1\right)\end{aligned}\quad (39)$$

Donde  $M_v$  es 0.018 kg/mol,  $R$  8.314 J/K.mol y  $T$  temperatura (k). Los flujos de Fick del aire seco y del vapor se definen de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}j_a &= -\beta\rho_g D\vec{\nabla} \frac{\rho_v}{\rho_g} \\ j_v &= -j_a\end{aligned}\quad (40)$$

Donde  $\beta = \tau(\omega - \theta w)$ ,  $\tau$  es la tortuosidad,  $D$  el coeficiente de difusión binario. La conducción térmica sigue la ley de Fourier, así:

$$q = -\lambda\nabla T \quad (41)$$

Donde  $\lambda$  es la conductividad térmica.

### 3.2.1.2 Modelo hidro-mecánico

La modelación del comportamiento hidro-mecánico para medios parcialmente saturados se puede realizar utilizando la teoría de Biot y el concepto de esfuerzos efectivos y a que el material es compresible elásticamente.

#### Medios Arcillosos

El modelo hidromecánico es descrito por la ley de Darcy.

$$S \frac{\partial \omega}{\partial t} + \omega \frac{\partial S}{\partial t} + \text{div}(-K\vec{\nabla} P_l) = q \quad (42)$$

Donde  $S$  es la saturación,  $\omega$  la porosidad,  $K$  la permeabilidad,  $P_l$  la presión líquida,  $q$  el término de la fuente. El incremento de porosidad  $d\omega$  esta unido al incremento del tensor de deformación  $d\varepsilon$ , dado por el modelo mecánico, a través de la relación  $d\omega = \text{tr}(d\varepsilon)$ .

El esfuerzo total es  $\sigma$ , el esfuerzo neto  $\sigma_{net} = \sigma - P_g I$ , con  $P_g$  como la presión de gas, y  $\sigma_{eff} = \sigma - P_l I$ .  $\sigma = \sigma_{net}$  como los esfuerzos efectivos si es no saturado ó  $\sigma' = \sigma - \max(P_g, P_l) I = \sigma - s I + P_g I$  si está saturado, siendo  $s = P_g - P_l$  la succión.



- Deformaciones elásticas:

$$d\varepsilon_{\sigma}^{v,e} = \frac{\kappa}{1+e} \frac{dp'}{p'} \quad (43)$$

$$d\varepsilon_s^{v,e} = -\frac{\kappa_s}{1+e} \frac{ds}{s + p_{atm}} \quad (44)$$

Donde  $e$  es la relación de vacíos ( $e = \omega/(1 - \omega)$ ),  $P_{atm}$  la presión atmosférica,  $\kappa(s)$  la rigidez al incremento de  $p'$  ( $\kappa(s) = \kappa_0(1 - \alpha_{\kappa} \ln s)$  con  $s$  en MPa ó  $\kappa(s) = \kappa_0$  cuando  $s > 1$ , con  $\kappa_0 = 0.054$  y  $\alpha_{\kappa} = 0.16$ ), y  $\kappa_s(s, p')$  la rigidez al incremento de  $s$  ( $\kappa_s(s, p') = \kappa_{s0}(1 - \alpha_{\kappa s} \ln(p'/p_{ref})) e^{-\beta_{\kappa s s}}$ , con  $\kappa_{s0} = 0.3$ ,  $\alpha_{\kappa s} = 0.1638$ ),  $p_{ref} = 0.01$  MPa y  $\beta_{\kappa s} = 0.03$  MPa<sup>-1</sup>.

- Deformación plástica total:

$$\begin{aligned} d\varepsilon_{\sigma}^{v,e} &= -\frac{\lambda - \kappa}{1+e} d \ln P_o = \frac{\lambda_o - \kappa_o}{1+e} d \ln P_o^* \\ &= -\frac{\lambda_s - \kappa_s}{1+e} d \ln(s_o + P_{atm}) \end{aligned} \quad (45)$$

$$\left( \frac{P_o^*}{p^c} \right)^{\lambda(o) - \kappa(o)} = \left( \frac{P_o}{p^c} \right)^{\lambda(s) - \kappa(s)} \quad (46)$$

con  $P_o = p'$  si se alcanza la curva de carga-colapso, o  $s_o = s$  si se alcanza la curva de incremento de la succión; donde  $P_o^*$  la presión equivalente de consolidación en saturación,  $P^c$  la presión de referencia (1 atm),  $\nu$  el coeficiente de Poisson (0.4) y  $G$  el módulo de cortante (3 MPa),  $\lambda(s) = \lambda_0[(1 - r)e^{-\beta_{\lambda s}} + r]$  con  $s$  en Pa y  $\lambda_0 = 0.15$ ,  $r = 0.75$ ,  $\beta_{\lambda} = 0.05$  Pa<sup>-1</sup> y  $\lambda_s = cte$ .

Las leyes disponibles de  $\kappa$  (lineares o logarítmicas) dan como resultado valores completamente diferentes; teóricamente, esto junto con un conocimiento impreciso del límite de  $\kappa_s$ , tiene una gran importancia en la respuesta mecánica global de la muestra, puesto que esta controla la deformación elástica del medio.

### Medios Porosos

Para trabajar el comportamiento mecánico de los medios porosos parcialmente saturados, se considera un modelo poro-elástico no lineal bajo condiciones isotérmicas, el cual se basa en consideraciones termodinámicas. Bajo la asunción de transformaciones reversibles infinitesimales, de comportamiento isotrópico, considerando un cambio no disipativo de fase (entre el agua líquida  $l$  y su vapor  $v$ ) y de la mezcla gaseosa  $g$  como gas perfecto, y asumiendo que el comportamiento desviador de los medios porosos no está unido al cambio de volumen, las ecuaciones constitutivas del modelo se pueden expresar de la siguiente forma:

$$d\sigma_m = K_o d\varepsilon_v - b_i dp_i \quad (47)$$

$$d\underline{s} = 2Gd\underline{e} \quad (48)$$

$$\frac{dm_i}{\rho_i} = b_i d\varepsilon_v + N_{ij} dp_j \quad (49)$$

$\sigma_m$ ,  $\varepsilon_v$ ,  $p$ ,  $s$ ,  $e$ ,  $m$ ,  $\rho$  son respectivamente el esfuerzo medio, la deformación volumétrica, las presiones parciales, el tensor de esfuerzos desviador, el tensor de deformaciones desviador, las fuentes de masa del fluido y la densidad de los componentes ( $l$ ,  $v$ ,  $a$ ).  $K_0$  es el módulo drenado y  $G$  el módulo de cortante del material poroso.

Los coeficientes de  $b$  son:  $b_l = bS_{lq}$  y  $b_a = b_v = b(1 - S_{lq})$  con  $b = 1 - \frac{K_a}{K_s}$

Donde  $S_{lq}$  es la saturación líquida del medio poroso,  $K_s$  el módulo del esqueleto sólido y  $b$  el coeficiente de Biot. Los coeficientes  $N$  y  $b$  son no lineales. La saturación líquida  $S_{lq}$  se considera solamente dependiente de la presión capilar  $p_c = p_g - p_l$ .

La ley generalizada de Darcy describe el flujo de la fase líquida.

$$\underline{M}_l = -\rho_l \lambda_l \underline{\text{grad}} p_l \quad (50)$$

Donde  $M_l$  es el vector de flujo de masa del agua líquida y  $\lambda_l$  la conductividad hidráulica del medio poroso.

$$\lambda_l = \frac{kK_l^{rel}}{\eta_l} \quad (51)$$

Donde  $k$ ,  $K_l^{rel}$ ,  $\eta_l$  es la permeabilidad intrínseca, la relativa (líquido) y la viscosidad dinámica (líquido), respectivamente.

Dos fenómenos de transporte ocurren en la mezcla gaseosa: el flujo total de la mezcla gaseosa a través del medio poroso y el transporte difusivo en la mezcla gaseosa binaria. Usando la ley de Darcy para el transporte conductivo y la ley de Fick para el difusivo, el vector de flujo másico para el vapor y el aire seco,  $M_v$  y  $M_a$ , se pueden escribir como:

$$\underline{M}_v = -\rho_v \lambda_g \underline{\text{grad}} p_g - \rho_v F(1 - C_v) \underline{\text{grad}} C_v \quad (52)$$

$$\underline{M}_a = -\rho_a \lambda_g \underline{\text{grad}} p_g + \rho_a F C_v \underline{\text{grad}} C_v \quad (53)$$

$\lambda_g$  es la conductividad hidráulica del medio poroso (gas):

$$\lambda_g = \frac{kK_g^{rel}}{\eta_g} \quad (54)$$

Donde  $k$ ,  $K^{rel}_g$ ,  $\eta_g$  es la permeabilidad intrínseca, la permeabilidad relativa (gas) y la viscosidad dinámica del gas, respectivamente. Las permeabilidades relativas son generalmente dependientes de la saturación líquida.

F es el coeficiente de Fick:

$$F = \frac{D_{va} \tau \phi (1 - S_{lq})}{C_v (1 - C_v)} \left( 1 - \frac{M_v^{mol} - M_a^{mol}}{M_v^{mol}} \frac{\rho_v}{\rho_g} \right) \quad (55)$$

Donde  $M_i^{mol}$  con  $i = v, a$  es la masa molar,  $\tau$  el factor de tortuosidad,  $\phi$  la porosidad del medio y  $D_{va}$  el coeficiente de difusión del vapor de agua en aire.

$$D_{va} = 2.23 \times 10^{-5} \frac{p_{atm}}{p_{gz}} \left( \frac{T}{T_o} \right)^{1.81} \quad (56)$$

Componentes gaseosos y la mezcla de gas son considerados como gases perfectos. En las ecuaciones (52) y (53),  $C_v$  es la concentración molar de vapor en la mezcla gaseosa.

$$C_v = \frac{p_v}{p_g} \quad (57)$$

El equilibrio termodinámico entre el agua líquida y su vapor es traducido por la igualdad en cada instante de tiempo de la masa libre de entalpía de ambas fases. Bajo condiciones isotérmicas esto se puede escribir como:

$$\frac{\partial p_l}{\rho_l} = \frac{\partial p_v}{\rho_v} \quad (58)$$

Las ecuaciones de conservación másica para el agua y aire seco se escriben como:

$$\frac{\hat{c}}{\hat{c}t} [m_l + m_v] = -div[\underline{M}_l + \underline{M}_v] \quad (59)$$

$$\frac{\hat{c}}{\hat{c}t} [m_a] = -div[\underline{M}_a] \quad (60)$$

La ecuación linear de momento, despreciando los términos de la gravedad, es:

$$div[\underline{\sigma}] = 0 \quad (61)$$

Combinando las ecuaciones constitutivas del modelo mecánico (47 a 49), las ecuaciones constitutivas para el flujo del líquido de los poros (50 a 57), la ecuación de equilibrio (58) y las ecuaciones de conservación (59 a 61), se puede escribir un modelo matemático capaz de describir el comportamiento de los medios porosos parcialmente saturados bajo condiciones isotérmicas:

$$C_{lu} \frac{\partial}{\partial t} [div[\underline{\xi}]] + C_{lg} \frac{\partial p_g}{\partial t} + C_{ll} \frac{\partial p_l}{\partial t} = div[K_{lg} \underline{grad} p_g] + div[K_{ll} \underline{grad} p_l] \quad (62)$$

$$C_{gu} \frac{\partial}{\partial t} [div[\underline{\xi}]] + C_{gg} \frac{\partial p_g}{\partial t} + C_{gl} \frac{\partial p_l}{\partial t} = div[K_{gg} \underline{grad} p_g] + div[K_{gl} \underline{grad} p_l] \quad (63)$$

La ecuación clásica de equilibrio mecánica (61) combinada con las ecuaciones constitutivas 47 y 48. Los términos desconocidos del modelo son la presión del agua líquida  $p_l$ , la presión de la mezcla gaseosa  $p_g$  y el vector de desplazamiento del esqueleto sólido  $\underline{\xi}$ .

De manera general, el comportamiento de las barreras es complejo implicando un gran número de procesos, por lo cual, análisis numéricos están siendo utilizados. La solución numérica de los modelos que combinan los comportamientos hídricos, térmicos y mecánicos, se realiza por medio de software especializado de códigos de diferencias finitas como  $FLAC^{2D}$  (Fast Lagrangian Analyses of Continua) y de elementos finitos:

- *Code\_Aster*
- *CODE\_BRIGHT*
- *LAGAMINE*
- CASTEM2000
- CAST3M
- Comes-Geo

### 3.3 EJEMPLOS

Las estructuras dedicadas al almacenaje provisional de desechos radioactivos pueden ser de materiales como la arcilla principalmente por su baja conductividad hidráulica y gran capacidad para absorber y retener radionuclídeos ó el concreto de alta resistencia (HSC) por razones de durabilidad.

En esta sección se presentaran diferentes casos en los que se aplican los modelos THM para rocas agrietadas, arcillas y arenas.

#### 3.3.1 Arena Densa

En el caso de geo-materiales (suelo, roca, concreto ó materiales porosos polifásicos), los fluidos presentes en la matriz se componen por una fase líquida (agua) y una gaseosa (vapor de agua y aire seco ó mezcla de componentes condensables y no condensables), de manera similar en suelo y roca puede haber gas y petróleo (depósito de reserva).

Para la simulación de la localización de las deformaciones en suelos, se necesita de un modelo para geo-materiales polifásicos elasto-plásticos no-isotérmicos. El suelo se modela en este caso (Comes-Geo, elementos finitos) como un continuo poroso deformable no isotérmico donde el flujo de calor, agua y gas son tenidos en cuenta.

Esta sección toma como referencia principal el trabajo realizado por Schrefler, Pesavento, Sanavia y Gawin, el cual se encuentra documentado en “Multi-Physics

Problems in Thermo-Hydro-Mechanical Analysis of Partially Saturated Geomaterials”, si desea profundizar en el tema refiérase a éste.

### 3.3.1.1 Caso de estudio

En este caso se utiliza un modelo matemático general para la modelación no lineal de materiales porosos polifásicos que considera todos los fenómenos relevantes de transporte de masa y calor, reacciones químicas, cambios de fase y efectos mecánicos, simulando de esta manera el comportamiento quimo-térmico y mecánico de los medios porosos. A continuación se muestran las ecuaciones macroscópicas de conservación. Al final de este caso se encuentran las definiciones de cada una de las variables utilizadas.

Las interfaces entre los componentes con sus características termodinámicas son importantes para considerar relaciones constitutivas, las cuales están siendo consideradas en la definición de la forma general del modelo y en la segunda ley de la termodinámica, asumiendo químicamente no reactivos los componentes.

Las ecuaciones que gobiernan el comportamiento del suelo a nivel macroscópico, teniendo en cuenta que  $\alpha, \beta = s, w, g$ ,  $\alpha\beta = sw, sg, wg$  y  $\alpha\beta\gamma = swg$  son:

- Balance de masa para las fases e interfaces

$$\frac{D^\alpha \eta^\alpha \rho^\alpha}{Dt} + \eta^\alpha \rho^\alpha \operatorname{div} V^\alpha = \sum_\beta \hat{e}_{\alpha\beta}^\alpha \quad (64)$$

$$\frac{D^{\alpha\beta} a^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta}}{Dt} + a^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta} \operatorname{div} W^{\alpha\beta} = -\hat{e}_{\alpha\beta}^\alpha - \hat{e}_{\alpha\beta}^\beta + \hat{e}_{\alpha\beta\gamma}^{\alpha\beta} \quad (65)$$

Los términos de masa de la ecuación 64 corresponden al intercambio de masa con las interfaces que separan las fases individuales (cambios de fase). El último término de la ecuación 65 describe el intercambio de masa de las interfaces con su línea de contacto. Mientras que tres fases componen el medio, hay solamente una línea de contacto; esta línea de contacto no tiene propiedades termodinámicas.

- Balance de momento para las fases e interfaces

$$\eta^\alpha \rho^\alpha \frac{D^\alpha v^\alpha}{Dt} - \operatorname{div}(\eta^\alpha t^\alpha) - \eta^\alpha \rho^\alpha g = \sum_\beta \hat{T}_{\alpha\beta}^\alpha \quad (66)$$

$$\begin{aligned} a^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta} \frac{D^{\alpha\beta} w^{\alpha\beta}}{Dt} - \operatorname{div}(a^{\alpha\beta} s^{\alpha\beta}) - a^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta} g^{\alpha\beta} = & -(\hat{T}_{\alpha\beta}^\alpha + \hat{e}_{\alpha\beta}^\alpha v^{\alpha,s}) + \\ & -(\hat{T}_{\alpha\beta}^\beta + \hat{e}_{\alpha\beta}^\beta v^{\beta,s}) + (\hat{e}_{\alpha\beta}^\alpha + \hat{e}_{\alpha\beta}^\beta) w^{\alpha\beta,s} + \hat{s}_{\alpha\beta\gamma}^{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (67)$$

La ecuación 66 describe el momento de las interfaces, mientras que la ecuación 67 corresponde al momento de la línea de contacto  $wgs$  a la interfase  $\alpha\beta$ . En la última ecuación  $s^{\alpha\beta}$  es el tensor de esfuerzos de la superficie (simétrico).

- Balance de energía para las fases e interfaces

$$\eta^\alpha \rho^\alpha \frac{D^\alpha E^\alpha}{Dt} - \eta^\alpha t^\alpha : \text{grad} v^\alpha - \text{div}(\eta^\alpha q^\alpha) - \eta^\alpha \rho^\alpha h^\alpha = \sum_\beta \hat{Q}_{\alpha\beta}^\alpha \quad (68)$$

$$\begin{aligned} & \alpha^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta} \frac{D^{\alpha\beta} E^{\alpha\beta}}{Dt} - a^{\alpha\beta} s^{\alpha\beta} : \text{grad} w^{\alpha\beta} - \text{div}(a^{\alpha\beta} q^{\alpha\beta}) - \alpha^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta} h^{\alpha\beta} = \\ & = -[\hat{Q}_{\alpha\beta}^\alpha + \hat{T}_{\alpha\beta}^\alpha \cdot v^{\alpha,\alpha\beta} + \hat{e}_{\alpha\beta}^\alpha (E^{\alpha,\alpha\beta} + \frac{1}{2} (v^{\alpha,\alpha\beta})^2)] - \\ & [\hat{Q}_{\alpha\beta}^\beta + \hat{T}_{\alpha\beta}^\beta \cdot v^{\beta,\alpha\beta} + \hat{e}_{\alpha\beta}^\beta (E^{\beta,\alpha\beta} + \frac{1}{2} (v^{\beta,\alpha\beta})^2)] + \hat{Q}_{\alpha\beta\gamma}^{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (69)$$

La ecuación 68 describe la fuente de calor de la fase a las interfaces, relacionadas a los cambios de fase.

Los términos en corchetes en la ecuación 69 describen la energía de la fase a la interfase, energía asociada al momento y relacionada a la masa debido a los cambios de fase. El último término es el calor a la interfase de la línea de contacto.

- Balance de entropía para las fases e interfaces

Los flujos de entropía están definidos como flujo de calor dividido por la temperatura donde, la entropía externa se debe solamente a las energías externas. Así, el balance de entropía puede ser expresado como:

$$\eta^\alpha \rho^\alpha \frac{D^\alpha \lambda^\alpha}{Dt} - \text{div}\left(\eta^\alpha \frac{q^\alpha}{T^\alpha}\right) - \eta^\alpha \rho^\alpha \frac{h^\alpha}{T^\alpha} = \sum_\beta \hat{\Phi}_{\alpha\beta}^\alpha \Lambda^\alpha \quad (70)$$

$$\begin{aligned} & \alpha^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta} \frac{D^{\alpha\beta} \lambda^{\alpha\beta}}{Dt} - \text{div}\left(a^{\alpha\beta} \frac{q^{\alpha\beta}}{T^{\alpha\beta}}\right) - \alpha^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta} \frac{h^{\alpha\beta}}{T^{\alpha\beta}} = \\ & = -(\hat{\Phi}_{\alpha\beta}^\alpha + \hat{e}_{\alpha\beta}^\alpha \lambda^{\alpha,\alpha\beta}) - (\hat{\Phi}_{\alpha\beta}^\beta + \hat{e}_{\alpha\beta}^\beta \lambda^{\beta,\alpha\beta}) + \hat{\Phi}_{\alpha\beta\gamma}^{\alpha\beta} + \Lambda^{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (71)$$

Los dos primeros términos de la ecuación 70 describen la entropía de las fases e interfaces, mientras que el último es la tasa de producción neta de entropía en la fase. Los términos en paréntesis de la ecuación 71 son la entropía de las interfaces y resultan de la masa total (cambio de fase), donde el último de estos es la entropía a la interfase por la línea de contacto y el último término es la tasa de producción neta de entropía en la interfase.

Los términos relacionados con el intercambio de masa, momento, energía y entropía entre las interfaces vía las líneas de contacto deben satisfacer algunas restricciones, ya que las líneas de contacto no poseen ninguna propiedad termodinámica.

La segunda ley de la termodinámica se introduce al medio poroso polifásico, en el cual su esqueleto tiene reacciones químicas (deshidratación) y deterioramiento (daños termoquímicos y mecánicos).

El punto de partida es la segunda ley de la termodinámica escrita para un sistema polifásico, la cual indica que para cualquier proceso, la tasa de producción neta de entropía debe ser positiva.

$$\Lambda = \Lambda^s + \Lambda^w + \Lambda^g + \sum_{\alpha\beta=gs, gw, sw} \Lambda^{\alpha\beta} \geq 0 \quad (72)$$

Después de expresar los términos del índice de la producción neta de entropía en las fases e interfaces individuales, la ecuación 72 se convierte en:

$$\begin{aligned} & (1-n)\rho^s \frac{D^s \lambda^s}{Dt} - \text{div} \left( (1-n) \frac{q^s}{T^s} \right) - (1-n)\rho^s \frac{h^s}{T^s} - \hat{\Phi}_{sg}^s - \hat{\Phi}_{sw}^s + nS_w \rho^w \frac{D^w \lambda^w}{Dt} - \\ & \text{div} \left( nS_w \frac{q^w}{T^w} \right) - nS_w \rho^w \frac{h^w}{T^w} - \hat{\Phi}_{wg}^w - \hat{\Phi}_{ws}^w + nS_g \rho^g \frac{D^g \lambda^g}{Dt} - \text{div} \left( nS_g \frac{q^g}{T^g} \right) - \\ & nS_g \rho^g \frac{h^g}{T^g} - \hat{\Phi}_{gw}^g - \hat{\Phi}_{gs}^g + \sum_{\alpha\beta=gs, gw, sw} [a^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta} \frac{D^{\alpha\beta} \lambda^{\alpha\beta}}{Dt} - \text{div} \left( a^{\alpha\beta} \frac{q^{\alpha\beta}}{T^{\alpha\beta}} \right) - \alpha^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta} \frac{h^{\alpha\beta}}{T^{\alpha\beta}} + \\ & (\hat{\Phi}_{\alpha\beta}^{\alpha} + e_{\alpha\beta}^{\alpha} \lambda^{\alpha, \alpha\beta}) + (\hat{\Phi}_{\alpha\beta}^{\beta} + e_{\alpha\beta}^{\beta} \lambda^{\beta, \alpha\beta}) - \hat{\Phi}_{wgs}^{\alpha\beta}] \geq 0. \end{aligned} \quad (73)$$

Es conveniente utilizar la energía libre de Helmholtz, definida para las fases e interfases como:

$$A^\alpha = E^\alpha - T^\alpha \lambda^\alpha \quad \text{donde } \alpha = s, w, g \quad (74)$$

$$A^{\alpha\beta} = E^{\alpha\beta} - T^{\alpha\beta} \lambda^{\alpha\beta} \quad \text{donde } \alpha\beta = gw, ws, gs \quad (75)$$

La introducción de la ecuación de balance energético de la ecuación 68, permite que la tasa de producción neta de entropía en la fase sólida sea expresada como:

$$\begin{aligned} \Lambda^s = & -\frac{(1-n)\rho^s}{T^s} \left[ \frac{D^s A^s}{Dt} + \lambda^s \frac{D^s T^s}{Dt} \right] + \frac{(1-n)\rho^s}{(T^s)^2} q^s \cdot \text{grad} T^s + \\ & \frac{(1-n)}{T^s} t^s : \text{grad} v^s - \hat{\Phi}_{sg}^s - \hat{\Phi}_{sw}^s + \frac{\hat{Q}_{sg}^s}{T^s} + \frac{\hat{Q}_{sw}^s}{T^s}. \end{aligned} \quad (76)$$

Después de transformaciones similares realizadas para el resto de fases y para las tres interfaces, ecuación 69 y después del uso de la 74 y 75, la desigualdad de entropía 72 se puede escribir como:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{(1-n)\rho^s}{T^s} \left( \frac{D^s A^s}{Dt} + \lambda^s \frac{D^s T^s}{Dt} \right) - \frac{nS_w \rho^w}{T^w} \left( \frac{D^w A^w}{Dt} + \lambda^w \frac{D^w T^w}{Dt} \right) \\
 & -\frac{nS_g \rho^g}{T^g} \left( \frac{D^g A^g}{Dt} + \lambda^g \frac{D^g T^g}{Dt} \right) + \frac{1-n}{(T^s)^2} q^s \cdot \text{grad} T^s + \frac{nS_w}{(T^w)^2} q^w \cdot \text{grad} T^w \\
 & + \frac{nS_g}{(T^g)^2} q^g \cdot \text{grad} T^g + \frac{1-n}{T^s} t^s : d^s + \frac{nS_w}{T^w} t^w : d^w + \frac{nS_g}{T^g} t^g : d^g + \\
 & \sum_{\alpha\beta=gs,gw,sw} \frac{\alpha^{\alpha\beta} s^{\alpha\beta}}{T^{\alpha\beta}} : d^{\alpha\beta} - \sum_{\alpha\beta=gs,gw,sw} \frac{\alpha^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta}}{T^{\alpha\beta}} \left( \frac{D^{\alpha\beta} A^{\alpha\beta}}{Dt} + \lambda^{\alpha\beta} \frac{D^{\alpha\beta} T^{\alpha\beta}}{Dt} \right) \\
 & + \sum_{\alpha\beta=gs,gw,sw} \frac{\alpha^{\alpha\beta}}{(T^{\alpha\beta})^2} q^{\alpha\beta} \cdot \nabla T^{\alpha\beta} \\
 & + [\text{TERMS RELATED TO BODY SUPPLIES}] \geq 0.
 \end{aligned} \tag{77}$$

En esta ecuación se han introducido los tensores de tasa de deformación para las fases  $d^\alpha$  ( $\alpha = s, w, g$ ) e interfases  $d^{\alpha\beta}$  ( $\alpha\beta = gw, gs, ws$ ). Debido a la simetría del tensor parcial y del superficial de esfuerzo  $s^{\alpha\beta}$ , se tienen las siguientes identidades:

$$\sigma^\alpha : \text{grad} v^\alpha = \sigma^\alpha : d^\alpha \tag{78}$$

$$s^{\alpha\beta} : \text{grad} w^{\alpha\beta} = s^{\alpha\beta} : d^{\alpha\beta} \tag{79}$$

La energía libre de Helmholtz para las fases se asume que tiene la siguiente forma:

$$A^w = A^w(\rho^w, T^w, S_w) \quad A^g = A^g(\rho^g, T^g, S_g) \quad A^s = A^s(\rho^s, T^s, \varepsilon^s, \Gamma_{dehydr}, \xi, D) \tag{80}$$

y para las interfaces:

$$A^{\alpha\beta} = A^{\alpha\beta}(\Gamma_{\alpha\beta}, T^{\alpha\beta}, a^{\alpha\beta}, S_w) \quad \text{donde } \alpha\beta = gw, ws, gs \tag{81}$$

En la ecuación (80) para el esqueleto sólido, los efectos de las tres variables internas,  $\Gamma_{dehydr}$ ,  $D$  y  $\xi$  han sido consideradas también.

Después de calcular los derivados materiales del tiempo de la energía libre de Helmholtz 80 y 81, la desigualdad de entropía se convierten:



$$\begin{aligned}
 & -\frac{(1-n)\rho^s}{T^s} \frac{D^s T^s}{Dt} \left( \frac{\delta A^s}{\delta T^s} + \lambda^s \right) - \frac{nS_w \rho^w}{T^w} \frac{D^w T^w}{Dt} \left( \frac{\delta A^w}{\delta T^w} + \lambda^w \right) - \frac{nS_g \rho^g}{T^g} \frac{D^g T^g}{Dt} \left( \frac{\delta A^g}{\delta T^g} + \lambda^g \right) \\
 & - \sum_{\alpha\beta=gs, gw, sw} \frac{a^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta}}{T^{\alpha\beta}} \frac{D^{\alpha\beta} T^{\alpha\beta}}{Dt} \left( \frac{\delta A^{\alpha\beta}}{\delta T^{\alpha\beta}} + \lambda^{\alpha\beta} \right) + \frac{nS_w}{T^w} (p^w I + \sigma^w) : d^w + \frac{nS_g}{T^g} (p^g I + \sigma^g) : d^g \\
 & + \frac{1-n}{T^s} (p^s I + \sigma^s) : d^s - \left[ \frac{1-n\rho^s}{T^s} \frac{\delta A^s}{\delta \varepsilon^s} \right] : d^s + \frac{D^s n}{Dt} \left( \frac{S_w \rho^w}{T^w} + \frac{S_g \rho^g}{T^g} - \frac{\rho^s}{T^s} \right) \\
 & + \frac{(1-n)}{T^s} A_T \frac{D^s \Gamma_{dehydr}}{Dt} + \frac{S_w \rho^w}{T^w} + \frac{(1-n)}{T^s} Y \frac{D^s D}{Dt} \\
 & + \frac{D^s S_w}{Dt} \left( \frac{np^w}{T^w} - \frac{np^g}{T^g} - \frac{nS_w \rho^w}{T^w} \frac{\delta A^w}{\delta S_w} + \frac{nS_g \rho^g}{T^g} \frac{\delta A^g}{\delta S^g} - \frac{(1-n)\rho^s}{T^s} \frac{\delta A^s}{\delta S_w} \right. \\
 & \left. \sum_{\alpha\beta=gs, gw, sw} \frac{a^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta}}{T^{\alpha\beta}} \frac{\delta A^{\alpha\beta}}{\delta S_w} \right) + \left[ \begin{array}{l} \text{TERMS RELATED TO BODY SUPPLIES,} \\ \text{DEFORMATION OF THE INTERFACES,} \\ \text{PHASE CHANGES AND HEAT FLUXES} \end{array} \right] \geq 0
 \end{aligned} \tag{82}$$

Las siguientes definiciones han sido introducidas en 82.

- Presión macroscópica de una fase  $\alpha$

$$p^\alpha = (\rho^\alpha)^2 \frac{\partial A^\alpha}{\partial \rho^\alpha} \quad \text{donde } \alpha = s, w, g \tag{83}$$

- Tensión macroscópica interfacial de la interfase  $\alpha\beta$ .

$$\gamma^{\alpha\beta} = -(\Gamma^{\alpha\beta})^2 \frac{\partial A^{\alpha\beta}}{\partial \Gamma^{\alpha\beta}} \quad \text{donde } \alpha\beta = gw, gs, ws \tag{84}$$

- Afinidad química, siendo la fuerza impulsora de la reacción química, correlacionada al índice de grado de deshidratación,  $\dot{\Gamma}_{dehydr} = \frac{D^s \Gamma_{dehydr}}{Dt}$ , por medio de una ley del tipo de la de Arrhenius.

$$A_T = -\frac{\partial A^s}{\partial \Gamma_{dehydr}} \rho^s \tag{85}$$

Junto con las identidades.

$$\text{div} v^\alpha = d^\alpha : I \quad \text{donde } \alpha = s, w, g \tag{86}$$

$$T^{\alpha,s} = T^\alpha - T^s \tag{87}$$

En la desigualdad 82 aparecen cantidades en paréntesis multiplicadas por:  $\frac{D^\alpha T^\alpha}{Dt}$ ,  $\frac{D^{\alpha\beta} T^{\alpha\beta}}{Dt}$ ,  $d^\alpha$ ,  $d^{\alpha\beta}$  las cuáles no son variables primarias. Por lo tanto, el coeficiente de estas variables debe ser cero, porque 82 es válido para todos los estados termodinámicos. Por lo tanto las siguientes relaciones para las entropías y tensores de esfuerzo específicos son obtenidas:

$$\lambda^\alpha = -\frac{\partial A^\alpha}{\partial T^\alpha} \quad \text{donde } \alpha = s, w, g \quad \text{y} \quad \gamma^{\alpha\beta} = -\frac{\partial A^{\alpha\beta}}{\partial T^{\alpha\beta}} \quad \text{donde } \alpha\beta = gw, gs, ws \quad (88)$$

$$s^{\alpha\beta} = \gamma^{\alpha\beta} I \quad \sigma^w = -p^w I \quad \sigma^g = -p^g I \quad (89)$$

$$\sigma^s = \sigma_e^s - p^w I \quad (90)$$

$$p^c = \frac{T^{wg}}{n} \left[ -\frac{nS_w \rho^w}{T^w} \frac{\partial A^w}{\partial S_w} + \frac{nS_g \rho^g}{T^g} \frac{\partial A^g}{\partial S_g} - \frac{(1-n)\rho^s}{T^s} \frac{\partial A^s}{\partial S_w} - \sum_{\alpha\beta=gs,gw,sw} \frac{\alpha^{\alpha\beta} \Gamma^{\alpha\beta}}{T^{\alpha\beta}} \frac{\partial A^{\alpha\beta}}{\partial S_w} \right] \quad (91)$$

Donde

$$\sigma_e^s = -\rho^s \frac{\partial A^s}{\partial \mathcal{E}^s} \quad (92)$$

es el tensor de esfuerzos efectivos de la fase sólida.

$$p^s(\rho^s, T^s, E^s, S^w) = (\rho^s)^2 \frac{\partial A^s}{\partial \rho^s} \quad (93)$$

es la presión "termodinámica" de la fase sólida y  $p^c$  la presión capilar macroscópica "termodinámica", que considera los efectos de película de agua y la curvatura de la interfase agua-gas.

En estado de equilibrio una condición estacionara de la producción neta de entropía puede ser impuesta a una simplificación considerable del problema matemático. Así, la presión capilar tiene la siguiente forma simplificada:

$$p^c = p^g - p^w \quad (94)$$

y para bajos contenidos de agua (región higroscópica), cuando el agua esta presente solamente como una película fina en la superficie del esqueleto, tiene que ser interpretada como el potencial adsorbido de agua  $\Psi$  multiplicado por la densidad del agua  $\rho^w$ :

$$p^c = -\Psi \rho^w \quad \Psi = \frac{\Delta H_{ads}}{M_w} \quad (95)$$

Donde  $\Delta H_{ads}$  es la entalpía de adsorción.

La presión de la película de agua,  $p^w$  difiere de la presión de agua del depósito,  $p_o^w$  por una cantidad igual a la presión de desunión,  $\Pi^w$ :

$$p^w = p_o^w - \Pi^w \quad (96)$$

por lo tanto, la presión capilar en equilibrio se define como:

$$p^c = p^g - p^w = \Pi^w - s^{wg} J_{wg}^w \quad (97)$$

Para altos niveles de contenido de agua, (valores de saturación que exceden el punto de saturación sólida) la presión capilar es:

$$p^c = -s^{wg} J_{wg}^w \quad (98)$$

Similarmente, en la región higroscópica, la presión sólida termodinámica en el equilibrio puede ser expresada por un fórmula simplificada que desprecia el término relacionado con el espesor de la superficie del menisco (válida cuando el espesor de la película es menor que el radio de curvatura de las partículas sólidas).

$$p^s \cong \chi_s^{ws} (p_o^w - \Pi^w) + \chi_s^{gs} p^g + \chi_s^{ws} s^{ws} J_{ws}^s + \chi_s^{gs} s^{gs} J_{gs}^s \quad (99)$$

En la región no higroscópica (niveles moderados de humedad de la fase de saturación) las siguientes relaciones pueden ser obtenidas:

$$p^s \cong \chi_s^{ws} p^w + \chi_s^{gs} p^g + \chi_s^{ws} s^{ws} J_{ws}^s + \chi_s^{gs} s^{gs} J_{gs}^s \quad (100)$$

Solamente las características elásticas del material son afectadas, (componentes, mecánicos y termoquímicos) debido a la matriz de rigidez.

Para suelos, la elasto-plasticidad clásica ha sido utilizada. En particular, el modelo de Drucker-Prager con endurecimiento isotrópico lineal y flujo plástico no asociativo ha sido seleccionado por simplicidad para simular el comportamiento mecánico de suelos cohesivos y friccionantes.

Con este propósito, el algoritmo aplicado al modelo conduce a:

$$\sigma_{n+1}^{ep} = p_{n+1}^{tr} - 3\alpha_Q K [\Delta\gamma_1 + \Delta\gamma_2]_{n+1} \quad \text{para la zona de esquina.} \quad (101)$$

$$\sigma_{n+1}^{ep} = p_{n+1}^{tr} - 3\alpha_Q K + \left[ 1 - \frac{2G\Delta\gamma_{n+1}}{\|s_{n+1}^{tr}\|} \right] s_{n+1}^{tr} \quad \text{para el resto de la zona} \quad (102)$$

Además, de la segunda ley de la termodinámica se tiene la ley de Fick, la de Fourier y la de Darcy, que describen la difusión de componentes miscibles (vapor de agua y aire seco) en fase gaseosa, la transferencia de calor por conducción y el transporte de masa

debido al gradiente de la presión de gas y capilar, respectivamente.

Considerando las relaciones constitutivas obtenidas de la explotación de la desigualdad de entropía y despreciando la presencia de interfaces, del sistema general de ecuaciones, es posible extraer un modelo completo para el análisis del comportamiento termo-higro-químico y mecánico de los suelos bajo condiciones extremas.

Para describir únicamente el estado del material, se necesitan 4 variables de estado primarias, (presión de gas,  $p^g$ , presión capilar,  $p^c$ , temperatura,  $T$  y vector de desplazamiento,  $u$ , así como 4 variables internas que describen el progreso del proceso interno: grado de deshidratación,  $\Gamma_{dehydr}$  para el proceso de deshidratación, parámetro químico de daño  $V$  y deformación plástica  $\xi$  para suelos elasto-plásticos.

El modelo consiste en 5 o 7 ecuaciones: 2 balances de masa (ecuaciones de continuidad), balance de entalpía (energía), balance de momento linear (ecuación mecánica de equilibrio) y 1 o 3 ecuaciones de desarrollo.

Donde  $s$ ,  $w$ ,  $g$  es la fase sólida, líquida y gaseosa (vapor de agua  $gw$  y aire seco  $ga$ ) de la matriz de suelo, respectivamente.  $\alpha$  y  $\alpha\beta$  es la fase e interfase (fase  $\alpha$  y  $\beta$ ) genérica, respectivamente.

$A^i$  es la energía específica libre de Helmholtz,  $a^i$  la superficie específica,  $E^i$  la energía interna,  $h^i$  la fuente de calor y  $q^i$  el vector de flujo de calor, para  $\alpha$  o  $\alpha\beta$ .  $I^{\alpha\beta}$  es el exceso de densidad masica superficial y  $\gamma^{\alpha\beta}$  la tensión interfacial macroscópica, de la interfase  $\alpha\beta$ .  $C_p$  es el calor específico efectivo del medio poroso,  $C_p^i$  el calor específico ( $g$  y  $w$ ),  $J_d^i$  el flujo difusivo ( $gw$  y  $ga$ ),  $p^i$  la presión de la fase ( $g$ ,  $w$ ,  $s$  y parcial de  $ga$  y  $gw$ ),  $v^{is}$  la velocidad relativa ( $g$  y  $w$ ),  $\beta_i$  el coeficiente de expansión térmica ( $w$  y cúbico para  $s$ ,  $s+w+g$ ,  $s+w$ ),  $\rho$  la densidad aparente de un medio poroso,  $\rho^i$  la densidad ( $g$ ,  $w$ ,  $s$ ) y  $\rho^{gi}$  la concentración de masa de una fase en la gaseosa ( $a$ ,  $w$ ).  $e$  es la emisividad de la interfase,  $S_w$  la saturación volumétrica de la fase líquida (volumen líquido/volumen de poros) y  $D_d^{gw}$  el tensor efectivo de difusividad del vapor de agua en aire seco.

$S$  es el área total,  $\tilde{S}$  el área resistente del material no dañado,  $\lambda$  la entropía efectiva,  $A$  la tasa de producción neta de entropía,  $n$  la porosidad total,  $\hat{e}$  el término de intercambio,  $g$  la aceleración de la gravedad,  $V$  el parámetro de daño termo-químico,  $x_s^{ws}$  la fracción sólida de superficie en contacto con la película de agua,  $\Gamma_{dehydr}$  el grado de deshidratación,  $\gamma$  el multiplicador plástico,  $\mu^\pi$  la viscosidad dinámica de  $\pi$  ( $\pi = g, s$ ),  $\chi_{eff}$  la conductividad térmica efectiva,  $\bar{I}^v$  la presión de separación,  $\xi$  la deformación plástica equivalente,  $\sigma_0$  la constante de Stefan-Boltzmann ( $5.670 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-1}$ ).

$D$  es el parámetro de daño y  $d$  el de daño mecánico,  $E$  el modulo de Young y  $E_0$  el de material sin daño,  $K_T$  el modulo modificado del medio poroso y  $K_s$  el del material granular,  $k$  la permeabilidad absoluta (tensor o escalar) y  $k^{r\pi}$  la relativa de la fase  $\pi$  ( $\pi = g, w$ ),  $p_{atm}$  la presión atmosférica,  $p^c$  la capilar y  $p_o^g$  la inicial,  $T$  la temperatura absoluta,  $T_{cr}$  la crítica del agua y  $T_{max}$  la máxima alcanzada durante el proceso de deshidratación,



$\alpha_c$  el coeficiente de transferencia de calor convectivo,  $\beta_c$  el de masa y  $\bar{\beta}_{tr}$  el de deformación térmica normalizado,  $\Delta H_{vap}$  la entalpía de evaporación por unidad de masa y  $\Delta H_{dehydr}$  la de deshidratación,  $t$  el tiempo y  $\Delta t$  el intervalo,  $\hat{Q}$  el cuerpo que suministra calor y  $\hat{\Phi}$  el que suministra entropía,

$\tilde{q}$  es el vector de flujo de calor,  $u$  el de desplazamiento de la matriz sólida,  $d^s$  el tensor de la tasa de deformación,  $I$  el unitario,  $\sigma$  el de esfuerzo de Cauchy,  $\sigma_e^s$ ,  $\sigma'$  el efectivo de Bishop y  $\tilde{\sigma}_e^s$ ,  $\tilde{\sigma}$  el neto,  $\Psi$  la matriz Jacobiana y  $A$  la de rigidez de un material dañado y  $A_0$  la de un material no dañado.

### 3.3.1.2 Resultados

Para la simulación de una arena densa, se realizó un análisis de elementos finitos de suelos elasto-plásticos no-isotérmicos; el material se modeló como un continuo poroso polifásico donde el flujo de calor, agua y gas son tomados en cuenta.

En el análisis de elementos finitos, el comportamiento dilatante de las arenas densas es simulado seleccionando un valor positivo del ángulo del dilatancia. Para este material bajo condiciones globales no drenadas, el incremento de la porosidad debido a las deformaciones plásticas volumétricas causa el decaimiento de la presión del vapor de agua.

La localización de deformaciones es un fenómeno de inestabilidad del material de considerable interés debido a su importancia en la predicción de la falla del material. Es caracterizado por la acumulación de deformaciones en zonas estrechas bien definidas (bandas de cortante), donde el comportamiento del material es inelástico, mientras que las zonas restantes son elásticas. Los mecanismos que accionan la formación de bandas de cortante son in-homogeneidades en el material y concentraciones de esfuerzo, las cuales pueden presentarse, para geo-materiales polifásicos, debido a la interacción sólido-líquido.

Los resultados numéricos indican la acumulación pronunciada de deformaciones inelásticas después de 32 s, donde se presenta el contorno de deformación plástico. Las bandas de cortante se desarrollan desde la superficie inferior por el alto estado de esfuerzos debido a la carga de la gravedad y a las condiciones de restricción, propagándose hasta la superficie superior, donde las líneas de contorno de la deformación plástica se presentan a 6.5s, 12.5s y 32s. El contorno de la deformación volumétrica acentúa el comportamiento dilatante de las bandas de cortante, porque solamente valores positivos se desarrollan en las zonas plásticas, mientras que valores negativos se observan en la parte elástica. Por consiguiente, la presión del agua disminuye en las zonas plásticas hasta el desarrollo de presiones negativas. En estos valores de presión, una fase de vapor aparece porque la presión de saturación del agua a temperatura ambiente se alcanza. La cavitación del agua por lo tanto es descrita directamente por el modelo, donde la fase de vapor aparece solamente en las zonas de dilatancia plásticas. Al mismo tiempo, las bandas de cortante se saturan parcialmente y la temperatura disminuye levemente en las zonas plásticas debido al cambio de fase del



agua (evaporación) inducido por efectos mecánicos. También la permeabilidad disminuye en las bandas de cortante, debido a la ley constitutiva adoptada de Safai y Pinder y finalmente el agua fluye a las zonas plásticas dilatantes.

En el caso de pruebas de compresión no drenadas biaxiales monotónicas bajo presión constante de confinamiento, la localización de las deformaciones es observada cuando se desarrolla cavitación en el agua de los poros, con producción de vapor.

### 3.3.2 Roca Agrietada

El suelo se modelo, (CASTEM 2000, elementos finitos) resolviendo las ecuaciones numéricamente para un continuo anisotropico. La ventaja del acercamiento continuo es que este puede ser utilizado para modelar procesos THM en presencia de empalmes, que pueden tener una distribución espacial irregular o 'al azar' y un amplio espectro de tamaños y orientaciones, mientras que uno discreto puede llegar a ser rápidamente no tratable si el número de empalmes y su complejidad geométrica aumentan.

Partiendo de una matriz de roca con una distribución dada de empalmes, las leyes constitutivas del continuo son obtenidas por superposición lineal, basadas en los métodos desarrollados por varios autores, en particular Snow para las hidráulicas y Oda para las hidro-mecánicas. Las ecuaciones del continuo se formulan para una roca agrietada compuesta por una matriz elástica impermeable y empalmes elásticos, saturados.

Esta sección toma como referencia principal el trabajo realizado por Ababou, Millard, Treille, Durin y Plas, el cual se encuentra documentado en "Continuum Modeling of Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Processes in Fractured Rock", si desea profundizar en el tema refiérase a éste.

#### 3.3.2.1 Caso de estudio

El acercamiento continuo conduce a ecuaciones hidromecánicas anisotrópicas, equivalentes a la ley de Darcy y a las ecuaciones poro-elásticas de Biot, con una leve variación de los coeficientes tensoriales. Al final de este caso se encuentran las definiciones de cada una de las variables utilizadas.

Como asunciones básicas se tienen con respecto a:

- Procesos Térmicos: Las velocidades del fluido en los empalmes son muy pequeñas y los efectos de convección calorífica pueden ser despreciados.
- Procesos Hidromecánicos: El comportamiento mecánico de los empalmes es linear-elástico en compresión y tensión, cortante. El comportamiento hidráulico de los empalmes es gobernado por la ley de Poiseuille, el cual puede ser visto como una aproximación de todas las ecuaciones de Navier-Stokes (despreciando términos de inercia, efectos transitorios y componentes no-planares de flujo en cada empalme). La matriz de roca es un medio homogéneo, isotrópico, elástico, satisfaciendo la ley de Hooke. Finalmente, la matriz es impermeable dada la baja permeabilidad del

granito.

- Leyes y Ecuaciones Locales Constitutivas:

\* Para la matriz de roca, se utiliza la ley de Hooke:

$$\sigma_{ij} = \lambda e_{kk} \delta_{ij} + 2\mu e_{ij} \quad (103)$$

\* En cada grieta saturada, se utiliza el concepto de esfuerzo "efectivo" de Terzhagi:

$$\sigma'_{ij} = \sigma_{ij} + p \delta_{ij} \quad (104)$$

Donde la convención de esfuerzo compresivo negativo es utilizada. Es decir, que el esfuerzo efectivo es igual al esfuerzo total menos el esfuerzo negativo del fluido.

\* Los empalmes tienen un comportamiento elástico. Así, la abertura de las grietas varía linealmente con el esfuerzo normal efectivo:

$$\delta\sigma'_n = K_n \delta a \quad (105)$$

De igual manera, la longitud de la grieta varía linealmente con el esfuerzo efectivo cortante:

$$\delta\sigma'_s = K_s \delta \ell \quad (106)$$

Los coeficientes de rigidez de las grietas normal y cortante, son tomados como constantes, independientes del esfuerzo e iguales para todas las grietas.

\* Finalmente, el flujo de las grietas obedece la ley de Poiseuille:

$$V = a^2 \left( \frac{g}{12\nu} \right) J \quad (107) \quad J = -\nabla \frac{(p + \rho g z)}{\rho g} \quad (108)$$

Se determinan propiedades homogeneizadas equivalentes basadas en una aproximación lineal de superposición.

- Ley equivalente de Darcy (Hidráulica): La ley de Darcy se desarrolla para un flujo estático en roca. Primero, se utiliza la ley cúbica de Poiseuille para calcular la tasa de descarga de un solo empalme en función del gradiente hidráulico, así:

$$q = \left( \frac{a^3 g}{12\nu} \right) J' \quad (109) \quad J' = J - (J \bullet n)n. \quad (110)$$

En segundo lugar, se sobreponen las contribuciones de todas las grietas al flujo global, por adición aritmética de los  $q'$  locales, con  $J$  constante para todas las grietas. Esto da una relación lineal entre la tasa de descarga global o media (salida)

y el gradiente hidráulico global (entrada). El tensor equivalente de permeabilidad, es entonces:

$$Q_i = K_{ij} J_i \quad (111)$$

Este se expresa en términos de las aberturas y longitudes de las grietas, o de las porosidades de las grietas y las áreas específicas:

$$K_{ij} = \sum_{f=1}^N K_f (\delta_{ij} - n_{i,f} n_{j,f}) \quad (112)$$

Donde (geometría general):

$$K_f = \frac{4g}{12i} \frac{\Phi_f^3}{\sigma_f^2} \quad (113)$$

La segunda fórmula (113) da  $K_f$  en términos de la porosidad de la grieta y del área específica de la misma.

Finalmente, la porosidad hidráulica esta dada por:

$$\Phi = \sum_{f=1}^N \Phi_f \quad (114)$$

- Coeficientes de rigidez poro-elásticos equivalentes (mecánicos e hidro-mecánicos): Un esfuerzo basado en superposición se desarrollo para obtener leyes hidromecánicas para una roca elástica con muchas grietas. Las grietas o empalmes individuales fueron asumidos con un comportamiento elástico o linear bajo compresión y cortante y satisfacer de esta manera la aproximación de "esfuerzo efectivo" de Terzaghi.

Se asumen leyes elásticas lineares con coeficientes constantes. La deformación principal, debido al tensor de esfuerzo global impuesto, es calculada por superposición linear de los desplazamientos locales que ocurren a través de la matriz de roca y de los empalmes discretos, manteniendo el esfuerzo global constante. Esto lleva a leyes lineares hidromecánicas que unen el esfuerzo sólido y la presión del líquido a deformaciones sólidas y esfuerzos del líquido.

Los resultados se pueden resumir así:

Una relación entre variables globales  $e_{ij}$ ,  $\sigma_j$ ,  $p$ , se obtiene por:

$$e_{ij} = T'_{ijkl} \sigma_{kl} + B_{ij} p \quad (115)$$

Donde  $T'_{ijkl}$  y  $B'_{ij}$  son coeficientes equivalentes homogeneizados, el primero un tensor de 4to orden y el segundo uno de 2do orden, siendo éste únicamente geométrico.



Otra relación puede ser derivada por el mismo método de superposición, basado en la conservación de fluido-sólido. Esta relación une "producción de fluido" linear y esfuerzo "efectivo", así:

$$\xi = \frac{1}{K_n \ell} F_{ij} \sigma'_{ij} \quad \text{con} \quad F_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{f=1}^N \ell_f \sigma_f (n_i)_f (n_j)_f \quad (116)$$

$\xi$  representa la variación neta de volumen de líquido por unidad de volumen de medio deformable; esta relacionado con las deformaciones esféricas del sólido ( $e = e_{kk}/3$ ) y del líquido ( $\varepsilon = \varepsilon_{kk}/3$ ) por la ecuación de conservación:

$$\xi = -3\Phi(\varepsilon - e) \quad (117)$$

Las relaciones tensoriales 115 y 116 necesitan ser invertidas para obtener formas convenientes del modelo continuo. Los nuevos coeficientes implicados en el esfuerzo-deformación son coeficientes de rigidez, 'inversos' en algunos sentidos del coeficiente principal de conformidad.

Ahora, la ecuación del tensor de 4to grado 115 es invertida usando manejo matemático y explotando las características particulares de simetría de los tensores elásticos, para el caso de medios no-ortotrópicos. La relación inversa es de la siguiente manera:

$$\sigma_{ij} = T_{ijkl} e_{kl} - B_{ij} p \quad (118)$$

Comparando término por término las ecuaciones 115 y 118 y tomando también en cuenta que  $T$  y  $B$  satisfacen las propiedades de simetría requeridas de los tensores elásticos, se obtiene la relación correcta entre un tensor simétrico de 4to grado y su inverso:

$$T'_{klmn} T_{mnij} = \frac{(\delta_{ki} \delta_{lj} + \delta_{kj} \delta_{li})}{2} \quad (119)$$

Al comparar otra vez 118 y 119 se obtiene una relación entre el coeficiente de Biot y su recíproco:

$$B_{mn} = T_{mnij} B'_{ij} \quad \text{ó} \quad T'_{klmn} B_{mn} = B'_{kl} \quad (120)$$

Finalmente, insertando 104 en 116 y usando relaciones previamente establecidas, resulta la ecuación que une la presión con la deformación o la deformación sólida y la producción de líquido.

$$p = -G(B_{kl} e_{kl} - \xi) \quad (121)$$

Las ecuaciones 118 y 121 son de la misma forma que las de la teoría de Biot, teniendo en cuenta lo anterior son generalizadas correctamente para poro-elasticidad anisotrópica completa. Es más, como consecuencia de la superposición linear y las ecuaciones de conservación, el coeficiente de "Biot" que aparece en la ley de

esfuerzo-deformación, es idéntica a la que aparece en la ley de presión-deformación.

Para roca agrietada, el coeficiente recíproco y el módulo  $G$  de Biot están dados por:

$$B'_{ij} = \frac{F_{ij}}{K_n \ell} \quad \text{y} \quad G = \{B'_{ij} (\delta_{ij} - T_{ijkl} B'_{kl})\}^{-1} = \{T'_{ijkl} B_{kl} (\delta_{ij} - B_{ij})\}^{-1} \quad (122)$$

El coeficiente de Biot clásicamente esta dado por:

$$\beta = 1 - \frac{K_b}{K_s} \quad (123)$$

El módulo de Biot es entonces:

$$G = \left[ \frac{(\beta - \Phi)}{K_s} + \frac{\Phi}{K_w} \right]^{-1} \quad (124)$$

y la rigidez esta relacionada con las constantes de Lamé por:

$$K_b = \frac{(\lambda + 2\mu)}{3} \quad (125)$$

Donde  $\lambda$  y  $\mu$  son los coeficientes de la matriz de Lamé ( $\lambda$  para compresión y  $\mu$  para cortante),  $\sigma'_{ij}$  es el esfuerzo efectivo,  $\sigma_j$  el esfuerzo total,  $p\delta_j$  el esfuerzo del fluido,  $\sigma'_n$  el esfuerzo normal efectivo,  $\sigma'_s$  el esfuerzo efectivo cortante,  $K_{ij}$  el tensor equivalente de permeabilidad,  $K_f$  la conductividad direccional de la grieta  $f$ ,  $T'_{ijkl}$  el coeficiente equivalente homogeneizado de total complacencia y  $B'_{ij}$  el de la unión-deformación,  $K_n$  y  $K_s$  los coeficientes de rigidez de las grietas normal y cortante y en el caso isotrópico  $K_b$  el módulo volumétrico de rigidez del medio drenado,  $K_s$  el de los “granos” sólidos individuales y  $K_w$  el del agua.

$\sigma_f$  es el área específica,  $\Phi_f$  la porosidad,  $a$  la abertura y  $\ell$  la longitud de las grietas,  $L$  el espaciamiento entre grietas,  $\Phi$  porosidad hidráulica,  $g$  la gravedad,  $\nu$  la viscosidad cinemática,  $J$  el gradiente hidráulico,  $q$  la tasa de descarga,  $J'$  la proyección de  $J$  en el plano de la grieta,  $Q$  la tasa de descarga global o media,  $\xi$  la “producción de fluido” lineal,  $p$  la presión del líquido en los empalmes,  $e$  la deformación esférica del sólido y  $\varepsilon$  la del líquido,  $B$  el coeficiente de Biot y  $B'$  su recíproco,  $V$  el vector de velocidad medio en el empalme,  $n$  el vector unitario normal a la grieta.

### 3.3.2.2 Resultados

Las leyes hidromecánicas fueron obtenidas por superposiciones lineares de flujos locales y de deformaciones locales y después identificadas con versiones anisotrópicas de la ley de Darcy y la teoría de Biot de mezclas poro-elásticas. El tensor de

permeabilidad, el de rigidez y los coeficientes de presión, están expresados en términos de: las características elásticas de la matriz de roca, las propiedades hidráulicas y elásticas de los empalmes y las propiedades geométricas de los empalmes.

Las variables principales son la temperatura, los desplazamientos con funciones base cuadráticas y presión con funciones base lineares. También se deben valorar los efectos posibles del comportamiento local no lineal de los empalmes. Las comparaciones de las simulaciones del continuo con modelos de empalmes discretos o hidromecánicos de elementos discretos, ayudarán a determinar y validar las características dominantes del modelo del continuo.

### 3.3.3 Polvo de Arcilla

El comportamiento mecánico de los suelos no saturados bajo condiciones isotérmicas (temperatura ambiente) es relativamente bien conocido, pero existe poca información experimental disponible sobre el comportamiento térmico de suelos no saturados. Es decir que los aspectos Termo-Hidro-Mecánicos tales como las trayectorias de humedecimiento y secado a diferentes temperaturas y los ciclos de drenaje de calor-frío y sus consecuencias en el comportamiento del cambio de volumen (contracción, hinchamiento y colapso, dilatación y contracción térmica) y los cambios en el contenido de agua en arcillas no saturadas, normalmente y sobre-consolidadas, no han sido estudiados.

En el caso no isotérmico, el efecto de la temperatura se integra al modelo del comportamiento elasto-plástico donde varios autores ponen en evidencia que la superficie de fluencia depende de la temperatura, el límite de la superficie entre los dominios elásticos y plásticos. En el caso isotérmico parcialmente saturado, se ha propuesto un modelo constitutivo general que tiene en cuenta el efecto de la succión en el comportamiento mecánico de los suelos confiando en el modelo modificado Cam-clay. Este tipo de suelo no ha sido estudiado experimentalmente, esta investigación es una de las primeras y se centra en el análisis de los efectos de temperatura e hidratación o secado de las arcillas, en el comportamiento de cambio de volumen, permeabilidad y características de retención de agua, ante una variedad de trayectorias de succión, esfuerzo neto y temperatura.

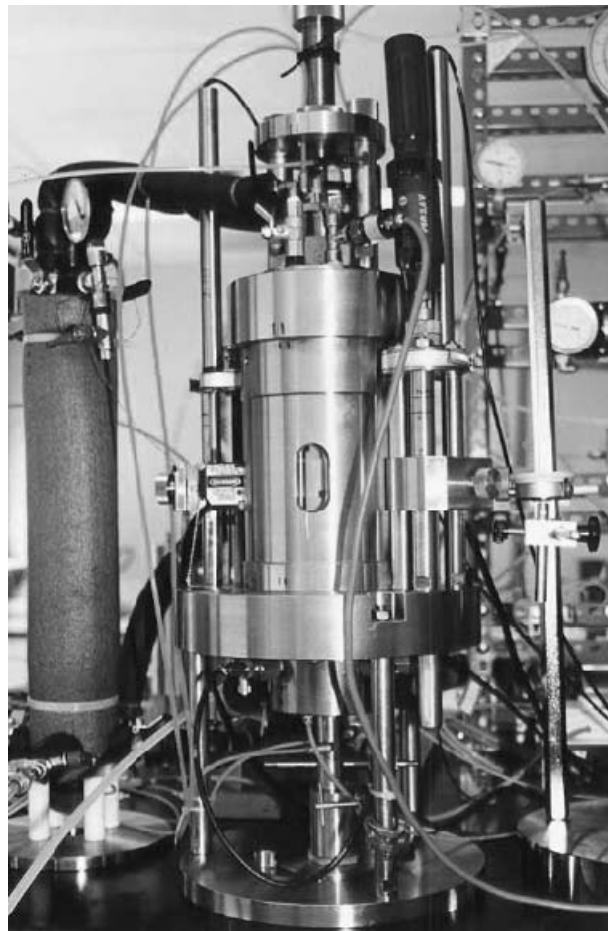
Esta sección toma como referencia principal el trabajo realizado por Morales, Gens y Lloret, el cual se encuentra documentado en “Characterisation and Thermo-Hydro-Mechanical Behaviour of Unsaturated Boom Clay: an Experimental Study”, si desea profundizar en el tema refiérase a éste.

#### 3.3.3.1 Caso de estudio

En este estudio se utilizaron dos muestras de polvo de arcilla de Boom artificialmente agrupadas con una estructura de agregados, una de alta (tendencia al colapso) y otra de baja porosidad (tendencia al hinchamiento), exhibiendo pautas de comportamiento extremas de las arcillas parcialmente saturadas y cubriendo un ancho rango de grados de sobre-consolidación. Los cambios producidos por la acción mecánica, succión y

temperatura se interpretaron bajo un concepto elasto-plástico. Al final de este caso se encuentran las definiciones de cada una de las variables utilizadas.

Para el análisis de los efectos de la temperatura y succión sobre la compresibilidad de la arcilla, características reversibles e irreversibles del comportamiento de los cambios de volumen y contenido de agua bajo ciclos de humedecimiento-secado, calentamiento.-enfriamiento y carga-descarga, se diseñaron y construyeron nuevas celdas oedométricas y un equipo triaxial (Ver Figura 12) con control de temperatura esfuerzo, succión y temperatura. La celda triaxial, permite registrar la evolución temporal de las deformaciones axiales (a través de LVDT locales), de las deformaciones radiales y de las isócronas de los perfiles laterales (sensores láser electro-ópticos), que experimenta la muestra en diferentes trayectorias mecánicas, de hidratación y temperatura. En este equipo se llevaron a cabo dos tipos de ensayos: isotérmicos a dos temperaturas contrastantes y no isotérmicas. Los ensayos isotérmicos se enfocaron en trayectorias de humedecimiento y secado bajo esfuerzos netos verticales y medios constantes, en ciclos de carga y descarga a succión constante, así como en ensayos isócoros de presión de hinchamiento y retracción a succión controlada. De igual manera se realizaron ensayos oedométricos e isotrópicos, en los que se observaron pautas de comportamiento reversible e irreversible ante cambios de volumen (hinchamiento, colapso y retracción, así como dilatación y contracción térmica).



**Figura 12.** Foto de la Celda Triaxial (Esfuerzo, Succión y Temperatura).  
Tomado de Romero et al., 1999.

A continuación se muestran las bases teóricas del análisis y modelo. En el análisis realizado se consideraron las siguientes combinaciones de fenómenos:

- Transporte de calor (conducción de calor por la ley de Fourier, convección de calor por el agua líquida y por el vapor de agua y cambio de fase).
- Flujo de agua (fase líquida por la ley de Darcy y difusión del vapor de agua según la ley de Fick y los cambios de fase).
- Flujo de aire (fase de gas por la ley de Darcy y flujo de aire disuelto a través del líquido).

La simulación de estos fenómenos interactivos se realiza por medio de un código de elementos finitos (CODE\_BRIGHT) solucionando simultáneamente las ecuaciones de conservación de entalpía (energía interna), de la masa de agua y el balance de masa de aire, junto con las restricciones apropiadas de equilibrio y las ecuaciones constitutivas.

Con respecto a las ecuaciones constitutivas térmicas, el flujo de calor conductivo es gobernado por la ley de Fourier. Los parámetros que definen la conductividad térmica son dados por la siguiente aproximación geométrica:  $\lambda = \lambda_{\text{sat}}^{S_r} \lambda_{\text{dry}}^{(1-S_r)}$ . Para no presentar cambios en la distribución de temperatura debido a los procesos de secado y humedecimiento (unión térmica e hidráulica), no se introducen variaciones en el grado de saturación  $S_r$  en la anterior expresión y así  $\lambda_{\text{sat}} = \lambda_{\text{dry}}$  son asumidas constantes.

El flujo de líquido y gas es asumido gobernado por la ley de Darcy:

$$q = -K_{\alpha} (\nabla P_{\alpha} - \rho_{\alpha} g) \quad \text{donde } \alpha = l, g \quad (126)$$

con  $K_{\alpha} = K K_{r\alpha} / \mu_{\alpha}$  ( $\alpha$  para el flujo de líquido ( $l$ ) o gas ( $g$ )).

La difusión molecular del vapor en aire es gobernada por la ley de Fick:

$$i_g^w = -D_g^w \nabla w_g^w = -(n \rho_g (1 - S_r) \tau D_m^w I + \rho_g D_g^w) \nabla w_g^w \quad (127)$$

Donde  $\tau = [n(1 - S_r)]^{2/3}$  considera las complejidades en la geometría de los poros que influyen con un efecto retardante el transporte de vapor y puede ser estimado según el área transversal disponible para el flujo de vapor. La permeabilidad relativa controla la variación de la permeabilidad en el régimen no saturado. El tensor mecánico de dispersión se puede despreciar si no hay un flujo de aire significativo y si la difusión molecular de vapor es eficiente.

Las principales variables independientes son la presión del gas (que puede ser despreciado puesto que es aproximadamente constante en espacio y tiempo y no está confinado durante la prueba) y la líquida, siendo esta última el más importante.

Donde  $\lambda_{\text{sat}}$  y  $\lambda_{\text{dry}}$  son las conductividades térmicas para condiciones saturadas y secas,  $u_w$  la presión líquida y  $u_a$  la de gas,  $D_m^w$  la difusión molecular de vapor en aire,  $\tau$  la

tortuosidad,  $\mu_a$  la viscosidad dinámica,  $i_g^w$  el flujo no advectivo de agua en gas,  $w_g^w$  la fracción de masa de agua en gas,  $K_{ra}$  la permeabilidad relativa,  $S_r$  el grado de saturación,  $K_a$  el tensor de permeabilidad,  $K$  el intrínseco de permeabilidad y  $D_g^w$  el de dispersión.

### 3.3.3.2 Resultados

Los ensayos sobre muestras altamente sobre-consolidadas revelaron un hinchamiento irreversible en las trayectorias de calentamiento bajo condiciones drenadas a succión constante, debido a una reestructuración del esqueleto de arcilla. Estos resultados mostraron valores similares ante cambios de volumen y contenidos de agua, a los obtenidos bajo condiciones isotérmicas en trayectorias de humedecimiento a diferentes temperaturas y estados de esfuerzos equivalentes.

La existencia de deformaciones plásticas importantes y de cambios irreversibles en el contenido de agua, asociados con las trayectorias principales de hidratación y secado, es un aspecto relevante de los resultados, siendo más importante a temperaturas elevadas. Los resultados a succión controlada y esfuerzo constante revelaron una contracción irreversible durante el calentamiento de una muestra de arcilla normalmente consolidada. Asimismo se identifica una zona de mínimo colapso y contracción en las trayectorias isotérmicas de humedecimiento bajo esfuerzo constante realizadas sobre muestras de alta porosidad.

Los ensayos isócoros sobre muestras de baja porosidad mostraron un hinchamiento dominante, asociado a una presión de hinchamiento mayor que la registrada por muestras de alta porosidad, donde se detecta un colapso macro-estructural compensado por la expansión reversible de la estructura. Las isócronas del desarrollo progresivo de los perfiles laterales del espécimen en la cámara triaxial permitieron detectar características no uniformes en la deformación de la muestra.

La capacidad de retención de humedad es influenciada por la temperatura, donde para un contenido de agua dado, la succión total decrece mientras la temperatura aumenta. Resultados isotérmicos de carga y descarga a succión constante presentan valores mayores del parámetro de compresibilidad a temperaturas más altas y parámetros de compresibilidad altos se obtienen a succiones bajas.

## 3.4 CARACTERÍSTICAS GENERALES

La temperatura afecta el comportamiento del suelo de diferentes maneras, induciendo efectos microscópicos y macroscópicos. Con el aumento de temperatura:

- Varía la densidad del agua líquida y gaseosa.
- El contenido de agua y la viscosidad del agua líquida disminuyen.
- Se reducen los esfuerzos cortantes entre partículas, ya que la temperatura actúa como un agente lubricante.
- La saturación se acelera.



- Aumenta la tasa de evaporación, la humedad relativa, la presión de poros, la permeabilidad (agua líquida), la viscosidad del gas y la difusividad (reducción de la viscosidad del agua del suelo).
- Se presentan deformaciones de hinchamiento más altas, condición más obvia a bajos niveles de esfuerzo.
- El fenómeno de dispersión es apreciable.

Es necesario tener en cuenta que la temperatura máxima con la que se pueden realizar pruebas es de aproximadamente 80°C (<100°C), esto para que no ocurran cambios apreciables de fase ni químicos.

La duración de las pruebas a altas temperaturas es grande, debido a ciertos fenómenos secundarios que han sido detectados en el hinchamiento bajo niveles de esfuerzo bajos (aspectos secundarios de la expansión).

El peso unitario seco alcanzado por una muestra caliente es mayor que una menos caliente para el mismo contenido de agua; este hecho se debe a la disminución de la resistencia cortante en el contacto entre los agregados, además de la reducción de la viscosidad que presenta el agua, la cual afecta la resistencia a la fricción.

Los suelos presentan comportamientos de esfuerzo-deformación no lineales e irreversibles, que además de depender de las trayectorias de temperatura, succión y esfuerzo también dependen del tiempo y de la química del agua de los poros.

Es necesario tener en cuenta que fenómenos de disolución-precipitación y redistribución de sales solubles dentro de la masa de suelo a altas temperaturas pueden tener cierta influencia en la organización y comportamiento micro-estructural del suelo.

Cuando el material no se encuentra inicialmente saturado y se hidrata bajo condiciones de confinamiento la muestra genera una presión de hinchamiento debido a la unión de dos comportamientos hídrico y mecánico.

Finalmente se puede decir que la deformación hídrica plástica es una deformación irreversible y que las deformaciones mecánicas son más grandes que las térmicas.

El comportamiento global de una estructura sometida a altas temperaturas se relaciona principalmente con los efectos termomecánicos (distribución de esfuerzos, agrietamiento). El comportamiento local está relacionado a la unión hidromecánica.

Deformaciones mecánicas y de succión son generalmente mucho más grandes que las térmicas.

La saturación de las muestras con agua al vacío es una condición importante para la determinación de los parámetros hidromecánicos, ya que la presencia de aire en el suelo tiene un efecto en la compresibilidad del fluido intersticial (agua).

Bajo esfuerzos de compresión hidrostática y condiciones drenadas y no drenadas, el comportamiento de las rocas es elástico.



#### 4. CONCLUSIONES

No existe una “mejor” técnica de remediación pero si una apropiada; esto se debe a que hay una gran variedad de métodos los cuales satisfacen ciertas necesidades, es por esto que al momento de escoger un sistema de remediación es necesario tener en cuenta principalmente las condiciones de sitio, el tipo de contaminante, las limitaciones económicas y de tiempo y los requerimientos a nivel local y nacional.

Existe una gran diversidad de métodos de remediación; sin embargo, la mayoría de éstos son más eficaces tratando contaminantes orgánicos en suelos granulares, ya que presentan una alta permeabilidad la cual facilita el paso del aire y por consiguiente su volatilización y degradación. Así que el tratamiento de suelos cohesivos contaminados con compuestos inorgánicos, siempre consumirá mucho más tiempo y será poco rentable.

Con el fin de mantener en buenas condiciones los acuíferos y suelos colombianos y prevenir futuros problemas ambientales y de salud pública es necesario implementar regulaciones y/o normatividades propias en las que se estipulen estándares de calidad y niveles máximos de concentración para diferentes tipos de contaminantes, ya que la actual resolución es una copia de la del estado de Massachussets, sin tener en cuenta que Colombia tiene unas características topográficas y climatológicas diferentes.

Dos procesos de transformación son los que principalmente controlan la eficacia del SVE, la volatilización y la biodegradación; estos procesos están relacionados y son controlados por factores similares. En la volatilización, los contaminantes se evaporan al contacto directo con el aire, mientras que en la biodegradación (oxígeno factor limitante), los contaminantes son transformados debido a la actividad microbiana.

Los componentes livianos (más volátiles) de los productos del petróleo como lo son los encontrados en la gasolina, muestran las mayores tasas de recuperación, ya que se transfieren más fácilmente a la fase gaseosa; contrario a lo que sucede con los compuestos pesados que se degradan a una tasa más baja y crean un lazo con las partículas del suelo, haciéndolas más difícil de tratar.

La temperatura influencia el comportamiento del suelo; en primer lugar, la temperatura cambia características hidráulicas del suelo (permeabilidad y retención del agua la cual se ve afectada levemente), así como las características mecánicas que dependen de la temperatura (el esfuerzo de pre-consolidación, los coeficientes de compresibilidad y las características de creep-expansión). También, afecta la respuesta mecánica del suelo, causando expansión del agua en los poros del suelo, induciendo la expansión de las partículas de arcilla y dilatación debido a la absorción de agua y activando el





reordenamiento de las partículas. La respuesta del suelo a éstos cambios depende de las condiciones de drenaje (trayectorias de drenaje o no-drenaje de calor), así como en el estado de esfuerzo (normalmente o sobre-consolidados).

Es necesario el desarrollo de equipo especial (oedométrico e isotrópico), que proporcione una descripción fenomenológica del comportamiento esfuerzo-deformación del suelo controlando esfuerzo, succión y temperatura, para de esta forma contar con datos experimentales, que sirvan más adelante para modelar mecanismos Termo-Hidro-Mecánicos.



## BIBLIOGRAFÍA

- [1] AURIAULT, J. et al. Poromechanics II. Lyon, 2002.
- [2] BARDET, JEAN P. Experimental Soil Mechanics. New Jersey, 1997.
- [3] BERRY, PETER L. REID, DAVID. Traducción: Bernardo Caicedo H. Mecánica de Suelos, Bogotá, 1993.
- [4] CONNELL, DES W. et al. Basic Concepts of Environmental Chemistry. Boca Ratón, 1997.
- [5] SCHNOOR, JERALD L. Environmental Modeling: Fate and Transport of Pollutants in Water, Air, and Soil. New York, 1996.
- [6] SCHWARZENBACH, RENÉ P. GSCHWEND, PHILIP M. IMBODEN, DIETER M. Environmental Organic Chemistry. New York, 2003.
- [7] TINDALL, JAMES A. KUNKEL, JAMES R. ANDERSON, DEAN E. Unsaturated Zone Hydrology for Scientists and Engineers. New Jersey, 1999.
- [8] URIBE, EDUARDO. SÁNCHEZ, ERNESTO. VIÑA, GERARDO. Impacto de los Derrames de Petróleo en Colombia. Proyecto Diagnostico y Control de la Contaminación Industrial. Departamento Nacional de Planeación Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo. Bogotá. Junio 1992.
- [9] CALDERÓN, SANDRA M. LIZCANO, ARCESIO. Remediación de Suelos Contaminados con Hidrocarburos. Tesis (Ingeniero Civil). Universidad de los Andes. Bogotá, 2004.
- [10] CALDERÓN, SANDRA M. LIZCANO, ARCESIO. Descontaminación de Suelos por el Método *Soil Vapor Extraction*. Tesis (Ingeniero Ambiental). Universidad de los Andes. Bogotá, 2005.
- [11] ECHEVARRÍA, MARÍA A. MOLANO, CARLOS E. Modelo de Remediación de Subsuelos Contaminados con Gasolina. Tesis (Magíster en Ingeniería Civil). Universidad de los Andes. Bogotá, 2005.
- [12] MIÑO, SERGIO A. MUÑOZ, JOHANNA, TOGNATO, CARLOS. Plan de Negocios para el Start-up de Ventas de Servicio de Bioremediación para la



- Descontaminación de Suelos Contiguos a la Perforación de Pozos Petroleros. Tesis (Ingeniero Industrial). Universidad de los Andes. Bogotá, 2005.
- [13] ROMERO, ENRIQUE. GENS, ANTONIO. LLORET, ANTONIO. Characterisation and Thermo-Hydro-Mechanical Behaviour of Unsaturated Boom Clay: an Experimental Study. Tesis (Doctoral). Universitat Politècnica de Catalunya. Barcelona, 1999.
- [14] AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. Annual Book of ASTM Standards. Filadelfia, 1964.
- [15] U.S. ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Test Methods for Evaluating Solid Waste, Physical/Chemical Methods.
- [16] ABABOU, R. MILLARD, A. TREILLE, E. DURIN, M. PLAS. F. Continuum Modeling of Coupled Thermo-Hydro-Mechanical Processes in Fractured Rock. Xth International Conference on Computational Methods in Water Resources. Heidelberg, Julio 1994.  
[http://rachid.ababou.free.fr/Research\\_Ababou/\\_Fractured-Porous-Media/RA\\_CMWR94\\_BMT3\\_art.PDF](http://rachid.ababou.free.fr/Research_Ababou/_Fractured-Porous-Media/RA_CMWR94_BMT3_art.PDF)
- [17] RUIZ, ERIC E. ARDINES, ISABEL A. DE FONG, ANA T. El Petróleo y su Proceso de Refinación. Maestría Administración Industrial, Universidad Tecnológica de Panamá. Julio 2000.  
<http://www.monografias.com/trabajos5/petroleo/petroleo.shtml>
- [18] SALINAS, RUTILIO O. Aspectos en la Contaminación del Suelo por Hidrocarburos en México. Biólogo. Agosto 2001.  
<http://www.monografias.com/trabajos7/hime/hime.shtml#cara>
- [19] SCHREFLER, BERNHARD A. PESAVENTO, FRANCESCO. SANAVIA, LORENZO. GAWIN, DARIUSZ. Multi-physics Problems in Thermo-Hydro-Mechanical Analysis of Partially Saturated Geomaterials. Italia, 2004.  
[http://arw-bled2004.scix.net/Files/acceptedpapers/schrefler\\_NATO\\_B.pdf](http://arw-bled2004.scix.net/Files/acceptedpapers/schrefler_NATO_B.pdf)
- [20] URIBE EDUARDO. Resolución 1170 de 1997 Departamento Administrativo de Medio Ambiente. Bogotá, 1997.  
<http://calsegen01.alcaldiabogota.gov.co:7772/sisjur/normas/Norma1.jsp?i=976>
- [21] Remediation Technologies. Environmental Restoration and BRAC. Environmental Services. Naval Facilities Engineering Services Center.  
<http://enviro.nfesc.navy.mil/erb/restoration/technologies/remed/main.htm>