

Modelación numérica de la superficie de fluencia de una mezcla hipotética de arena y metano hidratado

Marco Antonio Amaya Arciniegas

Universidad Nacional De Colombia

Facultad De Ingeniería, Departamento De Ingeniería Mecánica

Bogotá D.C., Colombia

2016

Modelación numérica de la superficie de fluencia de una mezcla hipotética de arena y metano hidratado

Marco Antonio Amaya Arciniegas

Tesis de Maestría presentada como requisito parcial para optar al título de:

Magister en Ingeniería Mecánica

Director:

PhD Juan Miguel Mantilla González

Línea de investigación:

Modelado de materiales y fenómenos físicos

Universidad Nacional De Colombia

Facultad De Ingeniería, Departamento De Ingeniería Mecánica

Bogotá D.C., Colombia

2016

Resumen

En el presente documento se acepta que la Superficie de Fluencia para la mezcla hipotética de arena y metano hidratado es definida geométricamente por el modelo CamClay¹, y tres parámetros geomecánicos a partir de los cuales se puede calcular la matriz de rigidez elástica y la matriz de rigidez plástica de dicho modelo. Este documento está compuesto por cinco Capítulos, a través de los cuales se presentan bases teóricas del material en estudio y de los modelos numéricos usados. Así mismo, se presentan los resultados de las modelaciones realizadas, las suposiciones aceptadas como válidas y el análisis de resultados, para finalmente ofrecer conclusiones y recomendaciones que serán de gran utilidad en estudios futuros.

En el primer Capítulo se explica qué son los hidratos de metano, dónde se encuentran en la naturaleza y se dan a conocer algunas de sus propiedades físicas, térmicas, químicas y mecánicas. De igual manera, se exponen algunas de las razones por las cuales se justifica el estudio de los hidratos de metano. En el Capítulo II se explican las bases teóricas sobre las cuales se fundamenta el modelo CamClay. De igual manera, se resumen algunos trabajos experimentales realizados sobre mezclas de sedimentos e hidratos que sirven para entender el comportamiento mecánico de dichos materiales. Por su parte en Capitulo III se presentan las bases teóricas del Método de los Elementos Discretos (DEM), y se muestran algunos resultados de las investigaciones más representativas que se han realizado con el uso del DEM, para el estudio del comportamiento mecánico de mezclas de sedimentos e hidratos de metano.

El Capítulo IV contiene las suposiciones y condiciones bajo las cuales se realizan los ensayos numéricos. De igual manera en el citado Capítulo se presentan los resultados de las modelaciones adelantadas a través de gráficas y tablas con las cuales se busca

¹ Modelo constitutivo Elasto-plástico usado para estudiar y predecir el comportamiento mecánico de suelos. Inicialmente fue desarrollado por Roscoe y Schofield en 1963, y modificado por Roscoe y Burland en 1968.

que los resultados sean claros, compactos y de fácil interpretación. En este Capítulo se demuestra que el Ángulo de Fricción global de la muestra estudiada, en ensayos de Corte Directo, no se ve influenciado por la Relación de Módulos ($E_{Hidrato}/E_{Arena}$), ni por el Coeficiente de Fricción asumido para el hidrato, razón por la cual no se presenta variación en la línea del estado crítico definida en el plano q, p'. De igual manera, parámetros como la pendiente de la línea de Compresión Virgen λ , y la pendiente de la línea de Recompresión κ , no exhiben mayor variación con el cambio en la Relación de Módulos ($E_{Hidrato}/E_{Arena}$), y el Coeficiente de Fricción propuesto para el hidrato. Finalmente en el Capítulo V se presentan las conclusiones y recomendaciones de la investigación.

Palabras claves: Metano Hidratado, Arena, Superficie de Fluencia, Modelo CamClay, Método de los Elementos Discretos.

Abstract

In this paper, it is accepted that the Yield Surface for the hypothetical mixture of sand and methane hydrate is geometrically defined by the CamClay Model, and three geomechanical parameters though which it is possible to calculate the elastic stiffness tensor and the plastic stiffness tensor of the model. The document consists of five chapters, through which some theoretical basis of the material under study and the numerical models that were used are presented; Likewise, the results of the modeling undertaken are presented, as well as the accepted assumptions and the analysis of results, to finally offer conclusions and recommendations that will be useful in future studies.

In the first Chapter, it is explained what methane hydrates are, and where those are found in nature; additionally some of their physical, thermal, chemical and mechanical properties are given. Similarly, some of the reasons that justified the study of methane hydrates are exposed. In Chapter II, the theoretical basis on which the CamClay model is based, are exposed. Similarly, some experimental work carried out on mixtures of sediments and hydrates and is summarized, and used as a framework useful to understand the mechanical behavior of these materials. Meanwhile, in Chapter III the theoretical basis of the Discrete Element Method (DEM) are presented, and the results of some of the most representative investigations that have been conducted with the use of the DEM are exposed.

Chapter IV contains the assumptions and conditions under which the numerical tests are performed. Similarly, in this chapter, using graphs and tables the results of the modeling are presented, always looking for a clear and compact format, that make it easy to interpret the information that is presented. In this Chapter, it is demonstrated that the overall Friction Angle of the sample, in the Direct Shear Tests, is not influenced by the modulus ratio($E_{Hidrato}/E_{Arena}$), nor by the coefficient of friction assumed for the hydrate. It means, there is no variation in the critical state line defined on the q, p' space. The same happens with parameters such as the slope of the Virgin Compression Line λ , and the slope of the Recompression Line κ , as they do not exhibit major variation with the Modulus Ratio ($E_{Hidrato}/E_{Arena}$), and with the Friction Coefficient proposed for the hydrate. Finally, in Chapter V the conclusions and recommendations of this research are presented.

Keywords: Methane Hydrate, Sand, Sand, Yield Surface, CamClay Model, Discrete Element Method.

Contenido

	Ob	vjetivos de la investigación	15	
	(Objetivo general	15	
	Objetivos específicos			
	Ju	stificación	15	
	Hip	pótesis de investigación	16	
	Alc	cance	17	
	Me	etodología	17	
I.	ł	Hidratos de metano	19	
	1.	Gases hidratados	19	
	2.	Formación de gases hidratados	20	
	3.	Depósitos naturales de gases hidratados	21	
	4.	Gases hidratados y su relación con el ambiente	25	
	5.	Gases hidratados y su relación con la industria	27	
	6.	Cambio de fase de gases hidratados	28	
	7.	Tipos de hidratos y formadores de hidratos	30	
	7	7.1 Hidratos tipo I	30	
	7	7.1.1 Formadores de hidrato tipo I	31	
	7	7.2 Formadores de hidratos tipo II	31	
	7	7.3 Formadores de hidratos tipo H	31	
	8.	El tamaño de la molécula huésped	31	
	9.	Características de la jaula tipo I	32	
	10	. Propiedades químicas del huésped potencial	33	
	11.	. Condiciones para la formación de hidratos	34	
	12	. Estado de equilibrio termodinámico	35	
	13	. Algunas propiedades físicas de hidratos	39	
		13.1 Masa molar	39	
		13.2 Densidad	40	
		13.3 Entalpía de fusión	40	
		13.4 Capacidad Calorífica	41	
		13.5 Conductividad Térmica	42	
		13.6 Difusividad Térmica	42	
		13.7 Propiedades Mecánicas y Granulometría	43	
		13.8 Volumen del Gas en Hidratos	44	

1	4. Bibliografía	.44
II.	Ensayos de laboratorio y la superficie de fluencia	47
1	. Superficie de fluencia	.47
2	. El Ensayo Triaxial	.51
	2.1 Prueba de Compresión Triaxial	53
3	. Plasticidad	.55
	3.1 El Bloque Friccional	63
	3.2 Potencial Plástico	65
	3.3 Normalidad o Flujo Asociado	66
	3.4 Relación entre esfuerzos e incrementos de deformación plástica	67
4	. El Modelo Cam Clay	.68
5	. Resistencia al corte de mezclas de sedimento y metano hidratado	.71
	5.1 Comportamiento de mezclas de hidrato y sedimentos, reproducidas en laboratorio	71
	5.2 Relación esfuerzo deformación para mezclas de metano hidratado y hielo, reproducidas en laboratorio	76
	5.3 Comportamiento in situ de mezclas de hidrato y sedimentos.	78
	6. Tendencias generales de comportamiento a usar en la modelación numérica	.79
7	. Bibliografía	.80
III.	El Método de los Elementos Discretos	82
1	. Método De Los Elementos Discretos	.82
	1.1 Ecuaciones de Movimiento	86
	1.2 Evaluación de las fuerzas de contacto	87
	1.3 Modelo Constitutivo Micro-Mecánico con Cohesión	90
2	. Software utilizado	.91
3	. Aplicación del DEM en el estudio de mezclas de hidrato y arena	.93
4	. Trabajos recientes	.99
5	. Bibliografía	100
IV.	Modelación y resultados	102
1	. Características mecánicas de las partículas	102
2	. Definición de los ensayos numéricos	103
	2.1 Preparación de la muestra	106
	2.2 Compresión unidimensional de la muestra	111
	2.3 Falla de la muestra	113
3	. Diseño de los experimentos numéricos	113
4	. Ensayos sobre muestras de arena	117

4	I.1 Corte Directo con los parámetros de la Tabla 1 (Arena sin hidrato)	119
5.	Ensayos sobre mezclas de arena e hidrato	139
6.	Sobre la variabilidad de los parámetros mecánicos	151
7.	Representación gráfica de la superficie de fluencia	151
8. E	Bibliografía	159
v. c	Conclusiones y Recomendaciones	160
1.	Conclusiones	160
2.	Recomendaciones	

Lista de figuras

Pág.

Figura I-1: Muestra esquemática de una molécula de gas hidratado, compuesta por moléculas			
de agua que forman una jaula al interior de la cual se ubica una molécula de gas 19			
Figura I-2: Relación Presión – Temperatura para la formación de hidratos de metano 20			
Figura I-3: Recursos potenciales de gas hidratado por regiones. Solo se incluyen reservorios			
que presentan altas concentraciones de hidrato en sedimentos arenosos, los cuales son			
como los más aptos para su explotación 22			
Figura I-4: Esquema representativo de la existencia de hidratos según el ambiente geológico.			
Figura I-5 : Representación esquemática de la distribución de arena e bidrato en denósitos			
submarinos.			
Figura II-1: Ensayo Triaxial Monotónico (color naranja), y ensayo Triaxial Dinámico (Color rojo). Velocidad de deformación axial 0.0055 mm/s. Amplitud de carga para el ensayo Triaxial Dinámico entre (0.01-0.06) KN 48			
Figura II-2: Comportamiento del incremento de presión de poros (Kpa), para el ensayo Triaxial			
Monotónico (color naranja), y para el ensayo Triaxial Dinámico (color gris) 48			
Figura II-3: Esquema de la superficie de fluencia para un material granular 49			
Figura II-4: Representación del tensor de esfuerzos aplicado a un medio granular a nivel macro			
52			
Figura II-6: (a) L íneas del Estado Crítico y Compresión Virgen Isotrónica en el plano $n' q = 54$			
Figura II-7: Esquema de la superficie de fluencia para un material granular en el plano $y \neq n'$ 54			
Figura II-8: Rutas de esfuerzos en el plano p', q, y cortes de la superficie de fluencia a			
Volumen especifico constante57			
Figura II-9: (a) Lineas del Estado Chilco y Compresion Virgen isotropica en el plano $v, q = 57$			
Figura II-10: Diagrama estuerzo normal versus volumen específico p , ϑ 58			
superficie de deslizamiento (línea inclinada solida) y potencial de deslizamiento para $Qy = 0$ (líneas horizontales no continuas). b). Sección a través de la superficie de fluencia y potencial de deslizamiento para P constante, con ruta de carga OABC			
Figura II-12: a). Vectores incrementales de deformación plástica normales a curvas de			
potencial plástico (líneas no continuas). b). Familia de curvas de potencial plástico y familia de curvas de fluencia (líneas continuas) 66			
Figura II-13: a) Curvas esfuerzo deformación para mezclas de arena e hidrato con saturación del 0%, 50% y 100%, y presión de confinamiento de 0.03 Mpa, 0.5 Mpa y 1 Mpa [1]. b) Curvas esfuerzo deformación, esfuerzo efectivo de confinamiento de 3Mpa, para una arena con tres concentraciones de hidrato 0%, 26.6% y 46.7% <i>72</i>			
Figura II-14: Variación del módulo secante con el confinamiento 74			
Figura II-15: Valores representativos obtenidos por T. S Yun et al., para mezclas de arena e bidratas obtenidos on laboratorio.			
Figura II-16: Relación entre la cohesión y el ángulo de fricción, con respecto al grado do			
saturación con hidrato			
Figura II-17: Relación esfuerzo desviador versus deformación axial, para mezclas de metano			
hidratado y saturación con hidrato del 0%, 10% y 30%.			
Figura II-18: Efecto de la presión de confinamiento y el contenido de Metano Hidratado. en el			
esfuerzo desviador al 15% de la deformación axial77			

Figura II-19: A) . Relación entre el esfuerzo desviador y la deformación axial, para diferentes temperaturas B). Relación entre el módulo E a bajas deformaciones y la presión de	rentes	
confinamiento para diferentes temperaturas	70	
Figura III-1 Esquema representative de des posibles medeles realégiess de contacte entre	_ /0	
nortígulos. En la imagon la rigidaz normal. Itt on la rigidaz tongonaial y on al conficien	ata	
particulas. En la imagen, κ_l es la nguez normal, κ_l es la nguez tangencial, μ es el coencier	ne oo	
Figure III & Depresente si figure de la la la la la conteste para al madela frégil	_ 82	
Figura III-2: Representacion esquematica de la Ley de contacto para el modelo fragil		
perfectamente elastico. (a) Relacion esfuerzo vs desplazamiento relativo normal (b) Relacior	1	
estuerzo vs desplazamiento relativo tangencial	_ 91	
Figura III-3: Parámetros mecánicos usados por J. Brugada et al. [1],	_ 94	
Figura III-4: Parámetros mecánicos usados por Jung, JW et al. [2]	_ 96	
Figura III-5: Esquema del ensayo físico propuesto por Mingjing Jiang et al [10], y curvas		
obtenidas por los mencionados autores.	_ 98	
Figura IV-1: Dominio global del medio granular a ser modelado (no se muestran las partícula	as).	
Eigure IV 2: Moldos poro construir la muestra. En color ozul con mallo gris co observe el Mo		
rigura iv-z: moides para construir la muestra. En color azur con maila gris se observa el mo	lae	
para facilitar la inserción de partículas en el Molde 1.	10 107	
Figura IV-3: Paso 250.000 de la modelación numérica. Se han creado e insertado 12000		
partículas de arena e hidrato. El Paso 250.000 equivale a 0.025 segundos	107	
Figura IV-4: Paso 7'000.000 de la modelación numérica. En este punto de la modelación se		
han insertado 220.000 partículas de arena e hidrato al inicio de la modelación. El Paso		
7'000.000 equivale a 0.7 segundos	108	
Figura IV-5: Paso 10'500.000 de la modelación numérica. El paso 10'500.000 equivale a 1.0)5	
segundos	108	
Figura IV-6: Paso 13'500 000 de la modelación numérica. En este punto de la modelación si	e	
han eliminado las partículas sobrantes. El Paso 13'500 000 equivale a 1.35 segundos	109	
Figura IV-7: Molde I Itilizado para consolidar la muestra y realizar el ensavo de corte directo.	105	
	100	
Figura IV-8: Muestra lista para ser sometida a pruebas de consolidación. Está conformada	109	
154620 partículas de hidrato de metano y 18550 partículas de arena	100	
Figure IV 9: Condiciones de frontero en el encoue de compreción unidimensional con	109	
rigura iv-9: Condiciones de frontera en el ensayo de compresión unidimensional con		
deformación radial nula, donde la compresión se realiza a velocidad constante.	110	
Figura IV-10: Condiciones de frontera en el ensayo de corte directo, donde el corte se realiz	a a	
velocidad constante	110	
Figura IV-11: Ejemplo de Diagrama esfuerzo normal versus volumen específico p', ϑ .	112	
Figura IV-12: Ejemplo de Diagrama esfuerzo normal versus volumen específico p', ϑ .	112	
Figura IV-13: A) Variación del esfuerzo vertical durante una etapa de relajación. B) Evolució	'n	
del esfuerzo cortante durante un ensayo de corte directo	118	
Figura IV-14: Ángulo de fricción movilizado en pruebas de Corte Directo. A) Para mezclas de	е	
sedimento con un 27% de saturación con hidrato. B) Para sedimento libre de hidrato.	118	
Figura IV-15 : Distribución granulométrica de las esferas con las cuales se representan las		
nartículas de arena. La muestra está conformada nor 19459 esferas	120	
Figura IV-16: Evolución del esfuerzo normal en el plano de corte, durante el desplazamiento		
la coia de corte. Dange de desplazamiente de 0.5 mm a 1 mm. El esfuerze normal promedio		
de 1922088.537 Pascales.	es 121	
Figura IV-17: Resultados de la simulación de un ensavo de Corte Directo, v resultados		
experimentales, curvas C ₁ v C ₂ , reportados por J.C. Santamarina et al. [1]. El esfuerzo norma	al	
promedio sobre el plano de corte en las simulaciones con el DEM fue 1922088 537 Pascales	s.	
	122	
Figura IV-18: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus		
desplazamiento, para un cambio de 0.4 en el coeficiente de fricción	172	
acopiazamiento, para un cambie de 0.4 en el coondicinte de modelh	-20	

Figura IV-19: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus	
desplazamiento, para un cambio de 0.5 en el coeficiente de restitución.	124
Figura IV-20: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus	
desplazamiento, para un cambio de 0.19 en el coeficiente de poisson.	125
Figura IV-21: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus	
desplazamiento, para un cambio de 2,95 x 108 Pascales en el módulo de Young.	125
Figura IV-22: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus	
desplazamiento, para un cambio de 0.004 m/s en la velocidad de corte de la muestra.	126
Figura IV-23: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus	
desplazamiento, para un ensayo con esfuerzo normal constante, y otro ensayo con esfuerzo	
normal variable	127
Figura IV-24: Relación entre el ángulo de fricción movilizado versus desplazamiento. La curv	va
amarilla es la seleccionada para la arena sin hidrato.	129
Figura IV-25: Relación de Vacíos versus Presión Normal - muestra 8P (Arena suelta).	130
Figura IV-26: Relación de Vacíos versus Presión Normal.	130
Figura IV-27: Relación de Vacíos versus Presión Normal.	131
Figura IV-28: Relación de Vacíos versus Presión Normal.	131
Figura IV-29: Relación de Vacíos versus Presión Normal.	132
Figura IV-30: Relación de Vacíos versus Presión Normal, para las etapas de carga y descar	ga
de la arena sin hidrato. Resultados obtenidos con modelaciones numéricas usando el DEM.	- 135
Figura IV-31: Relación de Vacíos versus Presión Normal, para muestras de arena fina.	137
Figura IV-32: Evolución del coeficiente K0 con el volumen específico. Primera etapa de Caro	ga.
	_ 137
Figura IV-33: Evolución del coeficiente <i>K</i> 0 con el volumen específico. Primera etapa de	
Descarga	137
Figura IV-34: Evolución del coeficiente K0 con el volumen específico. Segunda etapa de	
Carga	138
Figura IV-35: Evolución del coeficiente K0 con el volumen específico. Segunda etapa de	
Descarga	138
Figura IV-36: Evolución del coeficiente K0 con el volumen específico. Tercera etapa de Carg	ja.
	138
Figura IV-37: Volumen especifico versus Logaritmo de la Presión Normal para la muestra de	÷
arena sin hidrato. Las pendientes λ y κ , son los valores buscados para definir la superficie de	Э
fluencia de la arena según el modelo CamCay	139
Figura IV-38: Ángulo de fricción movilizado versus % de Desplazamiento de la caja de corte	,
para una relación de módulos de 1% y valores extremos del coeficiente de fricción asignado	al
hidrato.	141
Figura IV-39: Ángulo de fricción movilizado versus % de Desplazamiento de la caja de corte	,
para una relación de módulos de 100% y un coeficiente de fricción asignado al hidrato de 0.7	′5.
	142
Figura IV-40: Evolución de la relación K0, para un coeficiente de fricción entre partículas de	_
arena de 0.025, entre particulas de arena e hidrato 0.025, y entre particulas de hidrato 0.025).
a) En la etapa de carga y b) En la etapa de descarga.	144
Figura IV-41: Evolucion de la relacion <i>K</i> 0, para un coeficiente de fricción entre partículas de	`
arena de 0.025, entre particulas de arena e hidrato 0.35, y entre particulas de hidrato 0.35. a	i)
En la etapa de carga y b) En la etapa de descarga	145
Figura IV-42: Evolucion de la relacion K0, para un coeficiente de fricción entre partículas de	
arena de 0.025 , entre particulas de arena e nidrato 0.75, y entre particulas de hidrato 0.75, a	i)
En la etapa de carga y b) En la etapa de descarga.	146
Figura IV-43: Evolucion de los parametros λ y κ con la relacion de modulos, a) En la etapa de	le 1
carga y \mathbf{p}) \vdash n ia etapa de descarga.	149

Figura IV-44: Valor del volumen específico para la línea de compresión virgen anisotrópica a una presión de 1Mpa.
Figura IV-45: Ejemplo de la Línea de Compresión Virgen Isotrópica, la Línea de Compresión
Virgen Anisotrópica y la Línea del Estado Crítico en el plano $log p', \vartheta$ 153
Figura IV-46: Influencia del coeficiente de fricción asignado al hidrato, en los cortes de la
superficie de fluencia para una mezcla de arena e hidrato, cuatro volúmenes específicos y una
relación de módulos del 1% 157
Figura IV-47: Influencia del coeficiente de fricción asignado al hidrato, en los cortes de la superficie de fluencia para una mezcla de arena e hidrato, cuatro volúmenes específicos y una
relación de módulos del 100% 157
Figura IV-48: Influencia de la relación de módulos, en los cortes de la superficie de fluencia para una mezcla de arena e hidrato, cuatro volúmenes específicos y un coeficiente de fricción asignado al hidrato de 0.75
Figura IV-49: Influencia de la relación de módulos, en los cortes de la superficie de fluencia para una mezcla de arena e hidrato, cuatro volúmenes específicos y un coeficiente de fricción asignado al hidrato de 0.025158

Lista de tablas

Tabla I-1: Masa molar del metano hidratado a cero grados [10].	_ 39
Tabla IV-1: Parámetros mecánicos iniciales en la investigación.	102
Tabla IV-2: Ensayos usados para estudiar la sensibilidad del modelo frente al cambio en el	
valor numérico de las variables que hacen parte del Modelo de Contacto, la velocidad de co	rte
y/o la velocidad de compresión de la muestra. E representa el Modulo de Young de la partíc	ula,
$ u$ representa la Relación de Poisson de la partícula, $oldsymbol{eta}$ representa el Coeficiente de Restituci	ón
entre pares de partículas y μ representa el Coeficiente de Fricción entre pares de partículas	.114
Tabla IV-3: Ensayos realizados sobre la muestra de arena e hidrato. Enidrato representa e	əl
Modulo de Young para la partícula de hidrato, <i>Earena</i> representa el Modulo de Young para	a la
partícula de arena, μha representa el Coeficiente de Fricción entre pares de partículas de	
hidrato y arena, μhh representa el Coeficiente de Fricción entre pares de partículas de hidra	to.
Variables como la Relación de Poisson $ u$, y el Coeficiente de Restitución $oldsymbol{eta}$, no se analizan p	or
considerarse poco relevantes, como se demuestra en el numeral 4 del presente capítulo.	115
Tabla IV-4: Coordenadas de la línea de Compresión Virgen en la Figura IV-24.	135
Tabla IV-5: Coordenadas proyectadas de la línea de Compresión Virgen en la Figura IV-29.	135
Tabla IV-6: Valores de λ y κ obtenidos en simulaciones de ensayos de compresión	
unidimensional con deformación radial nula.	154
Tabla IV-7: Valores de $N - \Gamma$ obtenidos en simulaciones de ensayos de compresión	
unidimensional con deformación radial nula.	154
Tabla IV-8: Valores de volumen específico $\vartheta \lambda$, sobre la línea de compresión virgen anisotróp	oica
para una presión de 1 Mpa	154
Tabla IV-9: Valores de $N - \Gamma$ estimados a partir de la Tabla IV-8 y las ecuaciones 7 y 8	155

Objetivos de la investigación

La investigación se titula "Modelación numérica de la superficie de fluencia de una mezcla hipotética de arena y metano hidratado", y para su desarrollo se han propuesto los siguientes objetivos.

Objetivo general

 Modelar numéricamente la superficie de fluencia de una mezcla hipotética de arena y metano hidratado.

Objetivos específicos

- Identificar en la literatura existente las variables con mayor influencia en el desarrollo de la resistencia mecánica de mezclas de arena y metano hidratado. Estas variables serán aquellas que sean relevantes o de mayor importancia, para el estudio a grandes deformaciones o desplazamientos.
- Incluir en el método numérico a emplear en la investigación, el efecto de las variables que presentan mayor influencia en el desarrollo de la resistencia mecánica de mezclas de sedimentos y metano hidratado.
- Calibrar el modelo numérico con los resultados experimentales reportados por la comunidad científica.
- Modelar la variación de la superficie de fluencia bajo la suposición de validez del modelo CamClay.

Justificación

Las razones para adelantar investigaciones en el campo del comportamiento mecánico de mezclas de sedimentos e hidratos de metano, no son difusas para la gran mayoría de los posibles lectores, ya que es bien conocido que los hidratos de metano podrían ser una de las opciones más fuertes para suplir la demanda de energía en el futuro, esto desde el punto de vista económico y teniendo en cuenta la gran disponibilidad de dicho recurso natural. De esta manera, la pregunta a resolver estaría enfocada en las razones por las cuales se ha usado el Método de los Elementos Discretos para estudiar el comportamiento mecánico de mezclas de sedimentos e hidratos. En primer lugar y para dar respuesta parcial al interrogante planteado en el párrafo anterior, se esgrime como justificación la visión personal que los autores del presente documento tienen en lo referente a la modelación del comportamiento mecánico de medios granulares; pues para los mismos, una mejora en cualquier método de cálculo numérico se logra cuando el medio en estudio es reproducido en su esencia física en el método numérico. Es decir que un medio granular (por ejemplo una arena), no debe ser estudiado como un continuo si lo que se busca es avanzar en el entendimiento de su comportamiento, pues las variables que dan origen al mismo, se dan a nivel de grano y su estudio bajo la idealización de un continuo no permite comprender la importancia de cada variable, ni incluir la misma en modelos numéricos globales para el medio, razón por la cual no existirá interpretación clara del comportamiento observado a nivel macro.

La segunda razón para el uso del Método de los Elementos Discretos (DEM siglas en inglés para *Discrete Element Method*), se fundamenta en las propiedades del hidrato de metano, el cual permanece en estado sólido si se mantiene a altas presiones y bajas temperaturas. La extracción del hidrato desde el fondo del lecho marino generara alteración de las propiedades físicas de la muestra de una manera severa y significativa. Es por esta razón, que el Método de los Elementos Discretos se presenta como una de las mejores alternativas para el estudio de mezclas de sedimento e hidrato, ya que las características del sedimento (forma, distribución de tamaño y demás), pueden ser capturadas de manera adecuada mediante el uso de un Scanner. De igual manera, gracias a la gran disponibilidad de equipos de cómputo de alto rendimiento y el estado del arte en el citado método de IDEM, podrían superar en calidad a los resultados que se obtengan sobre muestras físicas en laboratorio, y permitir mayor profundidad en su interpretación.

Hipótesis de investigación

En una mezcla de arena e hidrato, cualquier cambio en las propiedades mecánicas del hidrato, genera cambios visibles en la superficie de fluencia de la mezcla.

Alcance

Se pretende realizar la modelación numérica de la posible variación en la superficie de fluencia de una mezcla hipotética de arena y metano hidratado al suponer que el modelo CamClay puede ser aplicado al estudio de dicha mezcla, para lo cual los parámetros necesarios para definir la superficie buscada (ángulo de fricción y pendientes de las líneas de compresión virgen y descarga), se obtienen al realizar modelaciones numéricas de ensayos de Corte Directo y Compresión Unidimensional, usando para ello el Método de los Elementos Discretos con partículas esféricas rígidas.

Teniendo en cuenta lo expresado en el párrafo anterior, se observa que el alcance del presente trabajo no puede ir más allá de lograr identificar tendencias de comportamiento que sean visibles bajo las simplificaciones y suposiciones acogidas, por lo que la reproducción detallada del comportamiento de mezclas de arena e hidrato se encuentra fuera del alcance del presente documento.

Metodología

Se da inicio a la investigación con la revisión bibliográfica de la información disponible en la Dirección Nacional de Bibliotecas de la Universidad Nacional de Colombia y la consulta de bibliografía obtenida directamente por los autores. Por ser la primera investigación conocida en Colombia en lo referente al estudio del comportamiento mecánico de mezclas de sedimentos e hidratos, y teniendo en cuenta algunas restricciones de tipo tecnológico (limitada capacidad computación), se ha optado por aceptar la validez del modelo CamClay, para representar la superficie de fluencia del material analizado y el Método de los Elementos Discretos para obtener los parámetros necesarios a usar en el modelo CamClay.

El análisis se realiza sin considerar el cambio de fase del hidrato, por lo que el mismo permanece en estado sólido en todas las etapas de la modelación numérica. De igual manera parámetros como la cohesión, cuya importancia se hace evidente a bajas deformaciones, se omiten ya que su influencia a grandes deformaciones es poco significativa. Teniendo en cuenta el comportamiento mecánico publicado por algunos autores y obtenido en ensayos de laboratorio sobre muestras reales, se selecciona un modelo de contacto a nivel de partícula, que permita incluir las variables con mayor relevancia en el modelo numérico a realizar haciendo uso del Método de los Elementos Discretos. De igual manera, a partir de los ensayos experimentales publicados por la comunidad científica, se realiza la calibración del modelo numérico, donde se busca ajustar los parámetros del modelo de contacto y el paso de tiempo de la modelación hasta obtener resultados coherentes.

Una vez calibrado el modelo numérico, se obtienen los parámetros para el cálculo de la superficie de fluencia, usando para ello los resultados de modelaciones numéricas de ensayos de Corte Directo y Compresión Unidimensional. Finalmente se analiza la influencia que puede tener la variación de los parámetros del modelo de contacto en la superficie de fluencia, se dan algunas conclusiones y recomendaciones.

I. Hidratos de metano

En este Capítulo se explica que son los gases hidratados, se presentan sus condiciones de formación, distribución, su importancia para el ambiente y la industria, su clasificación, y algunas de sus propiedades físicas y mecánicas, que son útiles en el proceso de formación de un marco de referencia sobre el cual se puede adelantar el estudio de este material.

1. Gases hidratados

Los gases hidratados son inclusiones cristalinas de agua y gas, que se forman cuando una fase acuosa, bajo condiciones de temperatura y presión apropiada, ver Figura I-2 y I-3, es puesta en contacto con gases de bajo peso molecular, como los hidrocarburos ligeros [1]. Es así que el metano hidratado es una sustancia química conformada por moléculas de agua y gas metano, donde las moléculas de agua forman una jaula sólida que encierra, sin unión química, moléculas de tamaño apropiado de gas metano [2], como se esquematiza en la Figura I-1.

Figura I-1: Muestra esquemática de una molécula de gas hidratado, compuesta por moléculas de agua que forman una jaula al interior de la cual se ubica una molécula de gas.



Fuente: Devinder Mahajan - Charles E, Taylor - G. Ali Mansoori [8]

La cantidad máxima de gas metano que podría obtenerse de los gases hidratados es establecida por la geometría del caltrato CH₄5.75H₂O [3]. Sin embargo experimentos

de laboratorio, han mostrado que en algunas ocasiones, es difícil alcanzar el 30% del valor teórico mencionado anteriormente [3].

2. Formación de gases hidratados

La formación de gases hidratados depende de la presencia de cantidades suficientes de agua, la presencia de gases que puedan dar origen a hidratos y condiciones apropiadas de temperatura y presión (Figura I-3) [3] [16]. Sin embargo la formación de gases hidratados también depende de la cantidad de sus componentes [3]. Es así que si hay muy poca agua o mucha agua, no se dará la formación de los gases hidratados aunque las condiciones de temperatura y presión sean las adecuadas [3], así mismo, la cantidad de gas deberá ser suficiente para exceder la solubilidad local [7] [14].



Figura I-2: Relación Presión – Temperatura para la formación de hidratos de metano.

Fuente: Sara Harrison (http://large.stanford.edu/courses/2010/ph240/harrison1/)

Como se ve en la Figura I-3, presión y temperatura son variables condicionantes para la formación de hidratos, por lo que su influencia en las propiedades mecánicas de mezclas de sedimentos e hidratos, necesita especial atención. Así mismo una variación en la presión puede alterar dramáticamente la temperatura a la cual un hidrato se hace estable, lo cual contrasta con el comportamiento del hielo, donde una variación de la presión no tiene un gran efecto en la temperatura a la cual el hielo se derretirá [4]. Por otra parte dependiendo de la presión, la temperatura bajo la cual diferentes gases hidratados son estables puede exceder significativamente el punto de fusión del hielo [4]. Este atributo permite que los hidratos coexistan en sedimentos saturados, donde quiera que la presión y temperatura sea la adecuada para la formación de hidratos y donde la cantidad de gas es suficiente para que el proceso de cristalización tenga lugar [4]. A una atmosfera de presión, el metano hidratado es estable a -80°C [14].

3. Depósitos naturales de gases hidratados

A pesar de los múltiples condicionamientos para la formación de hidratos, vastas cantidades de metano hidratado han sido descubiertas en sedimentos y rocas sedimentarias [3] donde los hidratos pueden ocupar completamente un vacío o poro, así como formar lentes, lóbulos, o láminas similares al permafrost [3] [4], ver Figura I-3 y I-4.

Los hidratos oceánicos mayormente se forman en sedimentos que pueden haberse depositado recientemente, en términos geológicos, y en los cuales muchos de los procesos diagéneticos y litológicos no han empezado a desarrollarse [4]. Por otra parte los sedimentos que comúnmente alojan hidratos no se encuentran a gran profundidad bajo el nivel del lecho marino, son relativamente débiles en términos mecánicos y son propensos a verse envueltos en colapsos a gran escala o redistribución si hay flujos de masa [4], como los que podrían generarse por el cambio de estado de solido a gas, de los hidratos.

De esta manera la formación de hidratos puede incrementar la resistencia de los sedimentos, y el cambio de estado de los hidratos (de solido a gas) puede generar el efecto contrario [4]. Según algunas investigaciones [11], los depósitos con mayor concentración de hidratos de metano y con mayor viabilidad para su explotación están conformados por arenas, ver Figura 1.5.

Figura I-3: Recursos potenciales de gas hidratado por regiones. Solo se incluyen reservorios que presentan altas concentraciones de hidrato en sedimentos arenosos, los cuales son vistos como los más aptos para su explotación



Fuente: Beaudoin, Y. C., et. al. [11]



Figura I-4: Esquema representativo de la existencia de hidratos según el ambiente geológico.

Fuente: Beaudoin, Y. C., et. al. [11]

Usualmente en el medio granular existe un flujo constante de gas y, por tanto el metano puede ser absorbido desde el terreno sobre el cual reposan los estratos en los que se esté formando el hidrato y ser liberado por las fronteras superiores del depósito, equilibrándose frente a cambios de presión, temperatura y regímenes geoquímicos [2], ver Figuras I-2 y I-4.

Dentro de la zona donde se alcanzan condiciones de estabilidad para la formación de hidratos, ver Figura I-2, el agua en su fase líquida y el hidrato pueden coexistir [7]. Sin embargo en esta región de dos fases, cualquier gas libre será completamente incorporado dentro de la estructura del hidrato debido a la abundancia de agua. Excepto en zonas de falla, donde el gas pasa a través de la zona estable para los hidratos y burbujea hacia la superficie [7].

Un aspecto relevante a resaltar en los depósitos de sedimentos e hidratos, es que generalmente existen dos regiones dentro de la zona de estabilidad de los gases hidratados, las cuales conservan una relación estrecha con la presión hidrostática y la presión lito-estática [3]. Es así que a partir de los 19 metros bajo el nivel del lecho marino y dentro de la primera región, la presión lito-estática genera una inevitable deformación de los granos [3] y la presión sobre las partículas sobrepasa la presión generada por los hidratos, los cuales resultan confinados por las partículas de sedimento [3].

Figura I-5: Representación esquemática de la distribución de arena e hidrato en depósitos submarinos.

Thinly interbedded

Massively-bedded

(Gulf of Mexico WR313; Mallik)

(Nankai Trough; Gulf of Mexico GC955)



Fuente: Beaudoin, Y. C., et al [11].

24

Sobre los 19 metros y en la segunda región, la presión de los hidratos es mayor que la carga aplicada a las partículas y la presión generada por los hidratos es capaz de separar las partículas de sedimento [3]. Un comportamiento similar es reportado por Dai, S et al [15], sin embargo la zona donde la formación de hidratos se da sin mayor desplazamiento de las partículas y casi que exclusivamente al interior de los poros del sedimento, se ubica a profundidades mayores a los 100 m y pude llegar a extenderse hasta los 900m medidos desde el lecho marino. Esta zona se ve favorecida por la presencia de sedimentos gruesos y presiones que van de 1 a 100 Mpa. La zona donde predomina el desplazamiento de los granos se ubica entre el nivel cero del lecho marino y profundidades de hasta 250 m, aunque es de resaltar que el desplazamiento de sedimentos típico de esta última región, donde existe abundancia de hidratos en nódulos, se favorece con la presencia de sedimentos finos tipo lodo [15].

Usualmente los depósitos de hidrato son identificados con exploración directa por perforaciones o haciendo uso de técnicas indirectas basadas en la trasmisión de ondas [16]. Por ejemplo para determinar la existencia de hidratos en un depósito de sedimentos, la geo-eléctrica se basa en el incremento anormal de la resistividad del sedimento que ocurre cuando sus poros se llenan con hidrato, mientras la geofísica se basa en el cambio en la velocidad de trasmisión de ondas sísmicas que ocurre cuando los granos de sedimento son cementados por el hidrato [16].

4. Gases hidratados y su relación con el ambiente

Las implicaciones de los vastos, dinámicos y previamente desconocidos depósitos de gas metano en el ciclo global del carbono, el clima a largo plazo, la estabilidad del lecho marino y las políticas económicas y energéticas globales, están siendo hasta ahora ampliamente estudiadas [2].

Muchos fenómenos naturales, incluyendo ciclos globales de temperatura, cambios en el nivel del mar y procesos de erosión y acumulación, continuamente alteran los perfiles de temperatura y presión en depósitos de gases hidratados que se encuentran cercanos a la superficie del mar [2]. Como resultado existe la posibilidad de periódicas y quizás masivas liberaciones de gas metano en el agua del mar y en la atmosfera, sin embargo, los gases hidratados son considerados como un medio efectivo para retener y almacenar dióxido de carbono de manera segura y de esta manera reducir la cantidad de gases de efecto invernadero en la atmosfera [1]. El metano es un gas de efecto invernadero, y su extracción comúnmente se encuentra acompañada de emisiones de carbono por fugas. Sin embargo la escala de su impacto no es bien conocida [11], y tampoco se tiene certeza si la explotación de metano estará acompañada de un impacto inferior o superior al actualmente existente. La prioridad en su explotación deberá evitar al máximo las emisiones de carbono [11].

Como cualquier hidrocarburo, la combustión de metano produce dióxido de carbono, sin embargo sus emisiones son un 40% menor a las producidas por la combustión del carbón sólido y un 20% menor a las producidas en la combustión del petróleo, por lo que su uso puede ayudar a disminuir las emisiones de carbono [11].

Adicionalmente el metano producido a partir de hidratos produce menos contaminantes cuando es quemado, incluyendo menos material particulado, dióxido de sulfuro y óxidos de nitrógeno y no produce hollín o desechos nucleares. Comparado con el metano obtenido de otras fuentes, produce menos sulfuro de hidrógeno y otras impurezas [11].

La combustión de madera tiene una relación hidrógeno/carbono, representada por un átomo de hidrógeno por cada 10 átomos de carbono, la combustión de carbón tiene una relación hidrógeno/carbono de 1 átomo de hidrógeno por cada átomo de carbono, la combustión del petróleo tiene una relación hidrógeno/carbono de 2 átomos de hidrógeno por cada átomo de carbono y la combustión del metano tiene una relación hidrógeno/carbono de 4 átomos de hidrógeno por cada átomo de carbono [11].

Teniendo en cuenta lo anterior, puede alegarse que si lo que buscamos es un cambio en el uso de energías con alta emisión de carbono hacia energías con baja emisión de carbono (proceso que es lento y gradual), el metano podría ser un buen candidato para dicho cambio.

La investigación de los gases hidratados es posible que se desarrolle con gran fuerza en la empresa privada, sin embargo es claro que sus intereses pudieren ser un poco divergentes en la relación con lo esperado para el beneficio público, razón por la cual es necesario que exista intervención directa y neutral por parte del gobierno en dichas investigaciones [11].

5. Gases hidratados y su relación con la industria

Investigaciones recientes han revelado que la presencia conjunta de agua y gas metano, permite que los hidratos de metano se formen y acumulen en cualquier lugar donde se satisfagan los requerimientos de presión y temperatura [2]. Por otra parte a pesar del gran tamaño de los depósitos naturales de metano hidratado, los mismos solo fueron descubiertos en laboratorio a principios de 1800 y pasaron más de 150 años antes de ser encontrados en la naturaleza [3]. Solo hasta 1980 se dio inicio a la búsqueda y caracterización de los depósitos de este material, estimándose que a la fecha los depósitos de metano hidratado podrían suplir las necesidades de energía a nivel global por los próximos 1000 años, estableciéndose como un eslabón primordial en la seguridad energética, la cual debe entenderse como más que la simple idea de una fuente confiable y económica de energía, sino como la diversidad de fuentes energéticas, la mitigación de posibles cortes de energía y la estabilidad económica [11].

Antes de 1980, los hidratos de metano eran conocidos como una rareza natural bajo el permafrost de Siberia, o como una molestia en las tuberías de conducción de gas [2]. Sin embargo, actualmente países como China, India, Japón, Corea, Rusia, Taiwán y Estados Unidos, cuentan con programas nacionales destinados a la investigación de los gases hidratados [9], cuyo fin es poder adelantar la explotación controlada de dicho recurso natural. El metano hidratado está presente en múltiples zonas del lecho marino y en el permafrost presente en zonas como Siberia y por esto es muy atractivo para las naciones con baja disponibilidad de recursos energéticos o alta demanda de los mismos [11].

Desarrollos recientes indican que los prospectos para una producción económica de gas metano desde hidratos son buenos y podrían ocurrir mucho más pronto de lo que se espera [2]. Por otra parte la mayoría de las organizaciones interesadas en el tema energético están de acuerdo en que una nueva fuente de energía será requerida para el año 2030, siendo los gases hidratados una buena opción para cubrir dicha necesidad [2]. Sin embargo ha de entenderse que el cambio de una fuente de energía a otra es un proceso lento; por ejemplo, al petróleo le tomó cerca de medio siglo remplazar al carbón como fuente domínate de energía [11]. Es así que el dominio real del petróleo como fuente principal de energía se empezó a dar a partir de 1965; sin embargo, el uso del gas metano no ha tenido un incremento tan notable como el

petróleo, pero su crecimiento ha sido constante y según investigaciones y análisis de mercado, podría ser la fuente dominante en el futuro y servir de puente hacia fuentes de energía libres de carbono [11].

Finalmente es preciso indicar que de llevarse a cabo la explotación de metano a partir de los hidratos existentes en depósitos naturales, esta explotación tendría inicio en depósitos arenosos que son aquellos con mayor viabilidad técnica y económica [16], ya que la explotación dependerá de las propiedades térmicas del medio, la permeabilidad de la formación y la variabilidad espacial, entre otros aspectos. Por ejemplo en depósitos arenosos de metano hidratado como Nankai Trough en Japón y Mallik en Canadá, se han registrado saturaciones con hidrato de hasta el 80% [16].

Es innegable que la explotación de este recurso enfrenta grandes retos, ya que por ejemplo los pozos de explotación pueden colapsar durante su construcción u operación, en razón a que la extracción del hidrato disminuye la fase solida del medio y esto pude convertir el sedimento en una fase fluida de arena y gas, que crece muy rápido en volumen y presión [16].

6. Cambio de fase de gases hidratados

En el área de la estabilidad mecánica de los lechos marinos que sirven de medio de acumulación a hidratos, el cambio de fase de estos materiales (hidratos) tendrá gran incidencia en la degradación de las condiciones de estabilidad de dichos depósitos y la posible falla de los mismos, razón por la cual resulta de gran importancia entender los mecanismos que generan el cambio de fase de los hidratos en su medio natural y el efecto que dicho cambio de fase pudiere tener sobre la respuesta mecánica de los depósitos de sedimentos donde se alojan los hidratos.

Muchos modelos termodinámicos para calcular el equilibrio de fases de los gases hidratados, han sido propuestos basados en el prominente trabajo de Van der Waals y Platteeuw (1959). Sin embargo actualmente no hay aún un modelo que, para el caso de sedimentos marinos, pueda predecir la relación temperatura presión para el equilibrio de las tres fases (Hidrato, agua y gas) [7]. Por otra parte para poder contemplar los efectos que el cambio de fase de un hidrato tiene en el sedimento en el cual se aloja, es necesario desarrollar un modelo que de manera precisa pueda predecir la relación temperatura presión para la triple fase de equilibrio (Hidrato, agua

y gas) y la solubilidad del metano en agua en la doble fase de equilibrio (hidrato, agua). Adicionalmente el modelo deberá tener en cuenta que el cambio de fase se dará en ambientes marinos y deberá incluir el efecto de la temperatura, la presión, la salinidad del medio, las fuerzas de capilaridad y otras variables como la influencia de la composición mineralógica de las partículas que conforman el sedimento donde se aloje el hidrato [7].

Algunas evidencias indican que el tamaño del poro, la textura de la superficie (del grano) y los minerales que componen las partículas de los depósitos de sedimentos donde se alojen hidratos, pueden afectar las condiciones para que se dé la triple fase de equilibrio para los gases hidratados (hidrato, agua, gas) [7], y en sí para que se dé la formación de hidratos [13]. Es así que experimentos llevados a cabo con materiales porosos, indican que las fuerzas de capilaridad inhiben la formación de gases hidratados en poros estrechos. Por otro lado estudios recientes indican que la textura (de la superficie del grano) y la composición mineral (del sedimento), tienen un efecto menor en la fase de equilibrio del metano hidratado [7].

El cambio de fase de los hidratos (de sólido a gas), causa reducción en la resistencia efectiva del sedimento. Es así que los sedimentos que alojan hidratos tienden a colapsar durante el proceso de cambio de fase, lo cual afecta la transferencia de calor y el movimiento del gas y del agua en el medio, sedimentos marinos, y por tanto afecta la tasa a la cual se presentará el cambio de fase del hidrato que aún no ha experimentado dicho proceso [6]. La literatura indica que el proceso de cambio de fase de hidratos, puede generar una pérdida de resistencia mecánica de los sedimentos que los contienen de aproximadamente el 50% [6]. Por otra parte algunos autores [6], han logrado realizar análisis del problema de cambio de fase y colapso de sedimentos, haciendo uso de la ecuación del balance de energía (para el proceso de cambio de fase fase inducido por una alteración térmica) y la ecuación de consolidación (para el sedimento).

Un punto a resaltar de los depósitos de cualquier tipo de material granulado, es que el movimiento de un fluido es permitido por la naturaleza porosa del sedimento y para el caso especial de los gases hidratados, mientras el hidrato cambia de fase generando agua y gas, el gas que es generado fluye hacia el exterior del depósito y el agua ocupa

el vacío dejado por el gas [6], lo cual implica un proceso complejo de cambio de volumen.

Otros autores [5] [12], reportan que la tasa a la cual se presenta el cambio de fase de los hidratos es sensitiva a las condiciones físicas y térmicas de las muestras evaluadas, así como al suministro de calor desde el ambiente y la presión [5]. Por otra parte la porosidad y la permeabilidad relativa son factores importantes que afectan el proceso de cambio de fase de los hidratos y la generación de agua y gas [5] que se produce por dicho proceso.

7. Tipos de hidratos y formadores de hidratos

Los hidratos están clasificados por el arreglo de las moléculas de agua en el cristal y de esta manera por la estructura del cristal. En el campo del petróleo dos tipos de hidratos se encuentran comúnmente y se conocen como tipo I y II o estructura I y II. Un tercer tipo de hidrato que también puede ser encontrado, es el tipo H, pero este último es poco frecuente [10].

7.1 Hidratos tipo I

La estructura más simple de un hidrato es la tipo I y está conformada por dos clases de jaulas: 1) Dodecaedro, que es un poliedro de 12 lados o caras, donde cada cara es un pentágono regular y 2) Tetra-decaedro, que es un poliedro de catorce lados o caras, donde 12 caras de las 14 son pentágonos y las dos restantes hexágonos. Las jaulas con 12 caras son más pequeñas que las de 14 caras. De esta manera las jaulas de 12 caras son llamadas "jaulas pequeñas" y las otras jaulas de 14 caras, son llamadas "jaulas grandes" [10].

Los hidratos tipo I, tienen 46 moléculas de agua por celda unidad. Por otra parte si cada jaula fuese ocupada por una molécula huésped (por ejemplo metano), la formula teórica para el hidrato seria X·5 3/4 H₂O, donde X es el formador de hidrato (por ejemplo el metano). Un hidrato estable se puede formar sin que una molécula huésped ocupe todas las jaulas. Adicionalmente el grado de saturación es función de la temperatura y la presión. Por esta razón la composición de los hidratos no es la composición teórica dada [10].

7.1.1 Formadores de hidrato tipo I

Algunos de los formadores de hidratos tipo I más comunes son el metano, etano, dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno. A excepción del etano que solo puede ocupar jaulas grandes el resto de moléculas huésped puede ocupar jaulas pequeñas y grandes [10].

7.2 Formadores de hidratos tipo II

La estructura de los hidratos tipo II es significativamente más compleja que la del tipo I y al igual que este último, se cuenta con dos tipos de jaulas, sin embargo dentro de los formadores comunes de hidrato, no se encuentra el metano [10].

7.3 Formadores de hidratos tipo H

Los hidratos tipo I y tipo II se pueden formar en la presencia de un único formador de hidrato, sin embargo los hidratos tipo H requieren dos formadores de hidrato para estar presentes, de los cuales uno de ellos puede ser una molécula pequeña tal como el metano y el otro una molécula grande que sea formadora de hidratos tipo H. Sin embargo en la literatura se indica que hidratos tipo H, no son encontrados comúnmente en la naturaleza [10].

8. El tamaño de la molécula huésped

Von Stackelberg estableció la relación entre el tamaño de la molécula huésped y el tipo de hidrato formado [10]. Según las investigaciones de este autor, moléculas con diámetro menor a 3.8 Å (aproximadamente), no forman hidratos ($1\text{\AA} = 1x10^{-10}\text{m}$). Es así que las moléculas más pequeñas que forman hidratos son el kriptón y el nitrógeno.

Moléculas con diámetros entre 3.8 a 4.2 Å forman hidratos tipo II con jaulas pequeñas y grandes. En el caso de moléculas con diámetros entre 4.4 y 5.4 Å, estas forman hidratos tipo I, siendo dichas moléculas suficientemente pequeñas para ocupar jaulas pequeñas y grandes [10]. Se resalta que en este rango tenemos las moléculas de metano con aproximadamente 4.4 Å de diámetro.

Moléculas con diámetro mayor a 5.6 Å y menor a 5.8 Å forman hidratos tipo I, con tamaño grande de jaula, pero en esta región las moléculas que comúnmente forman

este tipo de hidratos, no incluyen el metano. La próxima región que es representada por moléculas incluso más grandes (moléculas con diámetro entre 6 y 6.9 Å), forman hidratos tipo II y sólo ocupan jaulas grandes del mencionado tipo de hidrato. Moléculas con diámetro mayor a 7Å no dan origen a hidratos de tipo I ó II, sin embargo pueden formar hidratos tipo H, donde el diámetro máximo de la molécula formadora de hidrato es aproximadamente 9Å [10].

Como ha sido presentado hasta el momento, si la molécula es muy grande o muy pequeña no se formara el hidrato, ya que para un tipo de hidrato dado, una molécula muy grande no cabría en la jaula.

9. Características de la jaula tipo l

A continuación se presentan algunas características de la jaula tipo 1, sin embargo se omite dicha información para las jaulas tipo 2 y H, ya que el metano principalmente da origen a grandes depósitos submarinos de hidrato donde la jaula predominante es la tipo 1 [10].

- 1. Moléculas de agua por celda unidad: 46
- 2. Jaulas por celda unidad
 - a. 6 jaulas cuando estas son pequeñas
 - b. 2 jaulas cuando estas son grandes
- 3. Formula teórica
 - a. Con todas las jaulas llenas la ecuación será: X-5 3/4 H₂O, y se tendrá una fracción molar del hidrato formador igual a 0.1481
 - b. Cuando solamente las jaulas grandes están llenas, la ecuación será X·7 2/3 H₂O, y se tendrá una fracción molar del hidrato formador igual a 0.1154
- 4. Diámetro de la cavidad (Å)
 - a. 7.9 para jaulas pequeñas
 - b. 8.6 para jaulas grandes
- 5. El volumen de la celda unidad es 1,728 x $10^{-27} m^3$

6. Los formadores de hidrato típicos son el CH₄, C₂H₆, H₂S, CO₂

10. Propiedades químicas del huésped potencial

Otros factores limitantes para la formación de hidratos, son las propiedades químicas de la molécula huésped [14]. Es así que una molécula puede ser suficientemente pequeña para encajar por ejemplo en una jaula tipo 1, pero podría no dar origen a hidratos por sus propiedades químicas.

Con algunas excepciones, si un gas es altamente soluble en agua no formará hidratos [14]. Es así que gases que son altamente solubles en agua no formaran hidratos aunque su tamaño indique lo contrario. En este sentido, se tendrá como límite superior de solubilidad, la típica para CO_2 , H_2S y SO_2 [10]. Por otra parte si las moléculas interfieren con las uniones de hidrógeno, no se formaran los hidratos, por ejemplo el metanol que es una molécula pequeña, no forman hidratos ya que tiene uniones de hidrógeno y de esta manera interfiere con la unión de hidrógenos entre las moléculas de H_2O [10].

La formación de hidratos implica una transición pronunciada desde una condición de baja concentración de gas en el agua a una condición de alta concentración de gas en el hidrato [13]. Por otra parte la formación de hidrato causa exclusión de iones y de esta manera, la formación de hidrato se dificulta en la presencia de altas concentraciones de sal [13] [14]. Así mismo el incremento en la salinidad del medio sirve para extraer el metano diluido en el agua, pero su influencia se cree poco relevante para los depósitos naturales de hidratos, esto en comparación con los posibles efectos que podría tener un cambio en la presión o en la temperatura [16].

En presencia de agua, el cristal de hidrato se puede romper y liberar el metano por disolución cuando no hay suficiente gas formador en el agua circundante, o por disociación cuando se altera la presión y/o la temperatura, siendo esta última la que usualmente genera grandes cantidades de gas libre [16]. En el caso de la disolución, el hidrato se diluye en el agua incrementando la concentración de metano [16]. Lo otro que puede pasar es la precipitación que consiste en que durante la formación del hidrato se extrae el metano diluido en el agua para formar hidrato [16]. Por otro lado en presencia de hidrato la disolución y precipitación ocurren a la misma tasa, esto si la concentración de metano en el agua alcanza el límite de solubilidad [16]. Así mismo en

la ausencia de hidrato, las moléculas de metano se mueven a tasas iguales entre gas libre y disuelto en agua [16].

La solubilidad del metano en el agua es controlada en primer lugar por la presencia de hidrato y por la temperatura [16]. En ausencia de hidrato el metano se torna menos soluble con el incremento en la temperatura, ya que este genera un incremento de energía cinética con el cual la molécula de metano rompe los enlaces intermoleculares en el agua líquida, pasando así a ser gas libre [16]. Por su parte en presencia de hidrato ocurre algo similar, pues la molécula de metano rompe la jaula de hidrato y una vez fuera de esta se diluye en el agua incrementando su concentración [16].

En la ausencia de hidrato, la solubilidad se incrementa con el incremento de presión, por lo que en este caso el metano tenderá a existir como gas disuelto en lugar de gas libre [16]. En presencia de hidrato la solubilidad cae ligeramente con el incremento de presión y el metano tiene a estar al interior del hidrato en lugar de disuelto en el agua [16].

11. Condiciones para la formación de hidratos

Todo lo que se requiere para dar inicio a la formación de hidratos, es la presencia de cantidades adecuadas de moléculas que puedan dar origen a hidratos (por ejemplo moléculas de metano), suficiente agua y la combinación adecuada de presión y temperatura [16]. Se resalta que la fase del formador, metano para este caso, no se especifica por lo que puede ser cualquiera.

Las condiciones más comunes para la formación de hidratos involucran un gas, un líquido acuoso y el hidrato. Por otra parte haciendo uso de dichas condiciones, se han establecido relaciones experimentales que permiten estimar la relación presión temperatura a la cual se forman los hidratos. Es así que una de las relaciones experimentales comúnmente usadas, es la ecuación semi-empirica que se presenta a continuación [10], la cual tiene sus bases en la ecuación de Clausius-Clapeyron.

$$Ln P = A + BT + \frac{C}{T} + D Ln T$$
(1)

En la anterior ecuación, T representa la temperatura y se da en Kelvin y P representa la presión y es dada en Mega Pascales. Adicionalmente para el caso del metano los coeficientes son:

A=-146,1094 B=+0,3165 C=+16556,78 D=0

12. Estado de equilibrio termodinámico

Un sistema se encuentra en estado de equilibrio termodinámico, si es incapaz de experimentar espontáneamente algún cambio de estado bajo condiciones de borde fijas. Es decir que para estar en equilibrio termodinámico deberá encontrarse en equilibrio térmico, equilibrio mecánico y equilibrio de fases, este último a través del equilibrio de potenciales químicos. Si el potencial químico es alto, el componente tenderá a salir lo más rápido posible de la fase en que se encuentra y si es bajo tenderá a permanecer en la fase en que se encuentre.

Uno de los criterios para establecer el equilibrio termodinámico fue desarrollado hace 100 años atrás por Gibbs [10], quien manifestó que para alcanzar dicho equilibrio se deberá tener:

- a. Igual temperatura y presión en las fases
- b. Igual potencial químico en cada compuesto de las fases presentes
- c. Un valor mínimo de la energía libre de Gibbs

Este criterio es la base de los modelos para el cálculo del equilibrio de hidratos. Por otra parte la mayoría de los cálculos de equilibrio se basan en el potencial químico y fugacidades, sin embargo, los cálculos con hidratos se realizan usando el potencial químico y en estos cálculos, la minimización de la energía libre es importante [10]. Es de resaltar que la fase estable de hidratos (tipo I y II), es la que resulta en la mínima energía libre de Gibbs, por lo que el satisfacer los primeros dos criterios (a y b), no es suficiente para resolver el problema con hidratos [10]. La nucleación preferente de los hidratos en los poros de sedimentos, puede explicarse por la energía libre de Gibbs, ya que el cambio en esta, es menor cuando el hidrato se forma sobre el sedimento, que cuando se forma en presencia de solo agua [13].

Desde el punto de vista de la termodinámica, el proceso de formación de hidratos puede ser modelado en dos pasos que son hipotéticos. El primer paso es la transformación del agua pura en una jaula vacía de hidrato y el segundo paso, es el llenado de la jaula de hidrato [10]. El cambio en el potencial químico ($\Delta\mu$), para este proceso es dado por la siguiente ecuación, donde los exponentes se refieren a las fases:

$$\Delta \mu = \mu^{\mathrm{H}} - \mu^{\alpha} = (\mu^{\mathrm{H}} - \mu^{\beta}) + (\mu^{\beta} - \mu^{\alpha})$$
(2)

 α = Agua pura β = Jaula de hidrato vacia H= Jaula de hidrato llena (no es la entalpia)

En la ecuación anterior, el primer término a la derecha del igual representa la estabilización de la jaula de hidrato y el segundo término, representa un cambio de fase para el agua y puede ser calculado por medio de la termodinámica tradicional, así:

$$\frac{\mu^{\beta} - \mu^{\alpha}}{RT} = \frac{\Delta\mu(T, P)}{RT} = \frac{\Delta\mu(To, Po)}{RTo} - \int_{To}^{T} \frac{\Delta H}{RT^{2}} dT + \int_{Po}^{P} \frac{\Delta V}{R\overline{T}} dP$$
(3)

R=constante universal del gas T=temperatura absoluta P=presión H=entalpía V=volumen molar Δ =representa el cambio de la fase de agua pura (hielo o agua) a la fase de hidrato (tipo I y II)

La barra sobre la temperatura indica que es una temperatura promedio. Las propiedades necesarias para el cálculo están disponibles en la literatura. Por otra parte el modelo propuesto por Van Den Waals y Platteeuw fue el primer modelo para el cálculo de la formación del hidrato ($\mu^{H} - \mu^{\beta}$), y es un modelo estadístico. En este modelo la concentración del metano en el hidrato fue tratada de manera similar a la adsorción de un gas en un sólido [10]. Para una única molécula huésped, este término es evaluado como sigue,

$$\mu^{H} - \mu^{\beta} = RT \sum_{i} \vartheta_{i} Ln(1 - Y_{i})$$
(4)

Donde ϑ_i es el número de cavidades de tipo I y Y es una función de probabilidad. Y es la probabilidad de que una cavidad de tipo i sea ocupada por una molécula huésped y es dada por,
$$Y_i = \frac{C_i P}{1 + C_i P} \tag{5}$$

C_i es función de la molécula huésped y el tipo de jaula ocupada, así como de la temperatura y de la presión P.

El modelo de Van der Waals y Platteeuw, provee una buena base para ejecutar cálculos con hidratos, pero no es lo suficientemente aproximado para los cálculos en ingeniería [10]. Uno de los primeros modelos con el rigor requerido en los cálculos de ingeniería es el método o modelo de Parrish y Prausnitz el cual difiere del método de Van Den Waals y Platteeuw, en dos aspectos importantes [10]:

 a. El modelo propuesto por Parrish y Prausnitz extiende el análisis a mezclas de formadores de hidrato (metano, etc.), así:

$$\mu^{\rm H} - \mu^{\beta} = {\rm RT} \sum_{i} \vartheta_{i} \, {\rm Ln} \left(1 - \sum_{k} Y_{ki} \right) \tag{6}$$

Donde la segunda sumatoria actúa sobre todos los componentes. La función de probabilidad para un componente es:

$$Y_{ki} = \frac{C_i P_k}{1 + \sum_j C_{ij} P_j}$$
(7)

Aquí la sumatoria es también sobre el número de componentes y P es la presión parcial para un componente dado. Los otros componentes están incluidos en este término porque ellos están compitiendo para ocupar la misma jaula. De esta manera la presencia de otra molécula huésped reduce la probabilidad de que una molécula huésped pueda entrar en el lattice [10].

b. Parrish y Prausnitz remplazaron la presión parcial de la ecuación (7) con la fugacidad, para la cual no hay una definición simple, sin embrago algunas definiciones usuales dadas en libros de termodinámica se soportan en el potencial químico, el cual igualmente es una cantidad abstracta. Para este caso John Carroll

[10], propone considerar la fugacidad como una presión corregida, que representa estados no ideales. Es así que al sustituir la fugacidad en la ecuación B, se tiene:

$$Y_{ki} = \frac{C_i \ \hat{f}_k}{1 + \sum_j C_{ij} \hat{f}_j}$$
(8)

Donde \hat{f}_k es la fugacidad del componente k en la mezcla gaseosa. Esto permite que el modelo, pueda manejar problemas no ideales en la fase gaseosa y así puede ser extendido a mayores presiones. Adicionalmente algunos parámetros en el modelo fueron ajustados para reflejar el cambio de presiones a fugacidades y para mejorar el ajuste global del modelo. Es así que se necesitan parámetros C_i diferentes para este modelo, en comparación con los parámetros C_i que se necesitan para el modelo donde se usa la presión parcial en remplazo de la fugacidad [10].

Con el uso de las expresiones antes citadas y fijando la temperatura, la presión a la cual un hidrato se formara puede ser hallada como sigue:

Primero se ejecutan los cálculos asumiendo el tipo de hidrato a formarse y se usan las ecuaciones dadas anteriormente para calcular el cambio en la energía libre para el citado proceso. Este proceso iterativo continúa hasta que se satisface la siguiente ecuación.

$$\mu^{\rm H} - \mu^{\alpha} = 0 \tag{9}$$

Es importante recordar que en el punto de equilibrio el potencial químico de las dos fases debe ser igual. Para un componente puro donde el tipo de hidrato es conocido, el cálculo iterativo termina aquí (esto es solo si se ha seleccionado el tipo correcto de hidrato). Luego se repite el cálculo para el otro tipo de hidrato a la temperatura y presión calculada previamente. Es así que si el resultado de este cálculo es,

$$\mu^{\rm H} - \mu^{\alpha} > 0 \tag{10}$$

El tipo de hidrato asumido inicialmente es el hidrato estable y el cálculo termina. Si la diferencia en el potencial químico es menos que cero, el tipo de hidrato asumido para

empezar el cálculo es inestable. Así el proceso iterativo es repetido, asumiendo el otro tipo de hidrato.

13. Algunas propiedades físicas de hidratos

La estimación de las propiedades físicas de los hidratos es complicada ya que estas dependen del tipo de hidrato, la molécula huésped en el hidrato y el grado de saturación (no existe unión química entre el metano y la jaula de hidrato). Sin embargo la capacidad calórica y las propiedades eléctricas y mecánicas de los hidratos son similares a las del hielo. Por otra parte la conductividad térmica es única, ya que es significativamente diferente a la del hielo [10].

13.1 Masa molar

La masa molar (peso molecular) de un hidrato puede hallarse a partir de su estructura cristalina y grado de saturación. La masa molar de un hidrato, M, es dada por:

$$\rho = \frac{N_{w}M_{w} + \sum_{j=1}^{c} \sum_{i=1}^{n} Y_{ij}\vartheta_{i}M_{j}}{N_{w} + \sum_{i=1}^{c} \sum_{i=1}^{n} Y_{ij}\vartheta_{i}}$$
(11)

Donde N_w es el número de moléculas de agua por celda unidad (46 para el tipo I, 136 para el tipo II y 34 para el tipo H), M_w es la masa molar del agua, Y_{ij} es la fracción de ocupación de la cavidad de tipo i por componente j, ϑ_i es el número de cavidades tipo i, n es el número de cavidades de tipo i (dos para el tipo I y II, pero tres para tipo H), y c es el número de componentes en la celda. Esta ecuación involucra todos los tipos de moléculas presentes y entonces usa un número promedio para obtener la masa molar [10]. Por otra parte es interesante que la masa molar de los hidratos sea una función de la temperatura y la presión, ya que el grado de saturación es función de estas variables.

Tabla I-1: Masa molar	del metano	hidratado a	cero grados	[10].
-----------------------	------------	-------------	-------------	-------

	6	Masa molar	
Metano		(g/mol)	
(hidrato tipo I)	Pequeño	Grande	17.74
	0,8723	0,9730	,

13.2 Densidad

La densidad de un hidrato (ρ), puede ser calculada usando la siguiente expresión:

$$\rho = \frac{N_w M_w + \sum_{j=1}^{c} \sum_{i=1}^{n} Y_{ij} \vartheta_i M_j}{N_A + V_{cell}}$$
(12)

Donde N_w es el número de moléculas de agua por celda unidad (46 para el tipo I, 136 para el tipo II y 34 para el tipo H), N_A es el número de Avogadro (6,023 x 10^{23} moléculas/mole), M_w es la masa molar del agua, Y_{ij} es la fracción de ocupación de la cavidad de tipo i por componente j, ϑ_i es el número de cavidades tipo i, V_{cell} es el volumen de la celda unidad (1,728 x 10^{-27} m³ para tipo I), n es el número de cavidades de tipo i, y c es el número de componentes en la celda. Esta ecuación, puede ser reducida para un único componente en hidratos tipo I o tipo II [10].

$$\rho = \frac{N_w M_w + (Y_1 \vartheta_1 + Y_2 \vartheta_2) M_j}{N_A + V_{cell}}$$
(13)

Las ecuaciones 12 y 13, solo están representando el número de moléculas en una celda unidad de hidratos. De esta manera la masa de todas esas moléculas dividida por el volumen unitario del cristal, da la densidad del hidrato. Por ejemplo la densidad del metano hidratado a cero grados centígrados, con jaula tipo I es 0,913 g/cm³ [10] (0.929 g/cm³ a -10.15 grados centígrados según [16]).

13.3 Entalpía de fusión

Otra propiedad útil es la entalpía de fusión de los hidratos, a partir de la cual la cantidad de calor requerido para fundir un hidrato puede ser estimada. La entalpía de fusión para el metano hidratado con jaula tipo I varía entre 52.7 y 56,9 kJ por mol a cero grados Centígrados [16], mientras que la entalpia de fusión para el hielo es de 6,01 kJ/mol [10]. El hidrato de metano tiene menos energía interna que la combinación desordenada de metano y agua, por lo que se debe liberar energía para la formación de hidrato y adicionar energía para su disolución [16].

La entalpía de fusión es insensible a la temperatura o la presión (esto para condiciones de formación de hidratos), depende de la molécula huésped, pero primordialmente es función del número de uniones de hidrógeno en las moléculas de agua (típicamente hay 6 moléculas de agua por cada molécula huésped en la estructura I) [16].

Los valores de entalpia de fusión típicos para el metano hidratado, representan la formación de un hidrato a partir de una molécula de gas metano y agua líquida. Esto explica por qué la entalpía de fusión para el metano hidratado es significativamente más grande que el calor de fusión del agua. Por otro lado la entalpía de fusión del metano hidratado, es comparable a la entalpía de sublimación del hielo (la fase cambia de sólido directamente a gas), la cual es 51 kJ/mol [10]. Es así que en términos del valor numérico de la entalpia, el proceso de sublimación del hielo mantiene una mayor semejanza con la entalpia de fusión del metano hidratado [10]. Un método para estimar el efecto de la temperatura en el calor de fusión es la aproximación de Clapeyron [10] y [16],

$$\frac{\mathrm{dLnP}}{\mathrm{d}^{1}/\mathrm{T}} = \frac{\Delta\mathrm{H}}{\mathrm{zR}}$$
(14)

Donde ∆H es la entalpía de fusión, z es el factor de compresibilidad del gas a las condiciones de interés y R es la constante universal de los gases. Inherente en esta ecuación es la suposición que el volumen molar del líquido y el hidrato, es insignificantemente pequeño en comparación a la del gas (esta es la única suposición de la ecuación 14) [10] y [16]. Por otra parte a partir de la correlación LA+H+V, la derivada requerida para la ecuación 14 es obtenida como sigue,

$$\frac{\mathrm{dLnP}}{\mathrm{d}^{1}/\mathrm{T}} = \mathrm{BT}^{2} - \mathrm{C} + \mathrm{DT}$$
(15)

Es claro que existen marcadas diferencias entre el metano hidratado y el hielo y por tal razón no sería prudente suponer que en su totalidad las propiedades del hielo son semejantes o iguales a las del metano hidratado.

13.4 Capacidad Calorífica

Entendida como la energía necesaria para aumentar la temperatura de una determinada sustancia en una unidad (inercia térmica), es de especial interés para el estudio del cambio de fase de los hidratos, aunque hay limitada información

experimental para la capacidad calórica de hidratos. En el rango de temperaturas en los cuales los hidratos pueden existir, es aceptable asumir que la capacidad calórica para el metano es 40J/mol.°C y la capacidad calórica para el hielo es 37,1J/mol.°C [10]. A diferencia de la Conductividad Térmica, depende solo de la masa de sedimento, hidrato y agua, y no de su distribución a nivel de grano y poro.

Para el metano hidratado, esta propiedad tiene un valor inferior al 50% del valor representativo para el agua. Es así que la formación de hidrato altera fuertemente la Capacidad Calorífica del medio donde se aloje. Incluso en sedimentos donde la saturación con hidrato oscila entre el 20% y el 40%, la Conductividad Térmica disminuye un 10 % respecto a la del sedimento sin hidrato [16].

13.5 Conductividad Térmica

La conductividad térmica, cuantifica la eficiencia del transporte de calor. Para el caso del hidrato y el agua, este parámetro varía en menos del 10% a presiones y temperaturas que dan lugar a la formación de hidratos [16]. Hay limitados estudios acerca de la conductividad térmica de hidratos. Sin embargo los existentes muestran que los hidratos son mucho menos conductivos que el hielo. La conductividad térmica del hielo es 2,2W/mK, mientras la conductividad térmica de hidratos de hidratos de hidratos de hidratos setá en el rango de 0,50 \pm 0,07W/mK [10] y [16].

13.6 Difusividad Térmica

La difusividad térmica es una medida de la reacción de un material frente a un cambio de temperatura. Este parámetro es una relación entre que tanto se difunde la energía hacia el interior o exterior del material en relación con la capacidad de las moléculas para quedarse con la energía o permitir su salida (para el hidrato de metano tiene un valor cercano a 3.35 x $10^{-7} m^2/s$).

$$\kappa = \frac{\lambda}{\rho C_p} \tag{16}$$

Donde λ es la conductividad térmica, ρ la densidad y C_p es el Calor Especifico. La Difusividad Térmica, es más de dos veces la difusividad térmica del agua, por lo que

un depósito de sedimento con hidrato cambia mucho más rápido su temperatura que uno sin hidrato y este efecto se magnifica con el incremento de la porosidad [16].

13.7 Propiedades Mecánicas y Granulometría

John Carroll [10], manifiesta que en general, las propiedades mecánicas de los hidratos son comparables a las del hielo, sin embargo esto pude ser discutible como se observa en capítulos posteriores. Así mismo el mencionado autor señala que en la ausencia de información adicional, es seguro asumir que las propiedades mecánicas de los hidratos igualan las del hielo. Por otra parte en cuanto a la granulometría de los sedimentos en los cuales se alojan los hidratos de metano, algunos autores [11] [12], reportan tamaños de sedimentos que van desde una micra (arcillas y limos), hasta un par de milímetros, por ejemplo arenas con diámetro de 0.1 mm a 1 mm.

Volviendo sobre la energía libre de Gibbs, las investigaciones señalan [13], que para el caso en que la nucleación se da sobre las partículas de un determinado sedimento, dicha energía varia con respecto a las características de las partículas, como lo son su composición, cristalografía (donde se incluye la granulometría del hidrato), y cargas asociadas a sus superficie específica.

Usualmente al referirse a la granulometría de las mezclas de hidrato y arena, tiende a pensarse que solo importa el tamaño del grano de arena pues el hidrato seria solo un cementante existente entre partículas, sin embargo Stephan A. Klapp et al [14], manifiestan que es importante establecer el tamaño y distribución del grano de hidrato en la muestra, ya que del primero dependen las propiedades reológicas y químicas del grano de hidrato, por lo que el tamaño del grano de hidrato afecta de manera directa el comportamiento mecánico del sedimento que lo contenga. En el trabajo publicado por Stephan A. Klapp et al [14], se manifiesta que tamaño del grano de hidrato alcanzado en laboratorio es hasta un orden de magnitud inferior al encontrado en la naturaleza y por tal razón se advierte que las pruebas de laboratorio podrían no ser una representación fiel de la realidad.

Stephan A. Klapp et al [14], deja ver lo complicado de medir el tamaño del grano de hidrato por razones de su estabilidad termodinámica, sin embargo logra establecer un rango de tamaño que va desde las 200 a 600 micras, incrementándose su tamaño con

el paso de tiempo por engrosamiento del grano. Así mismo manifiestan que la descomposición del hidrato se presenta desde su capa externa hacia su interior.

13.8 Volumen del Gas en Hidratos

El metano hidratado a cero grados centígrados tiene una densidad de 913 Kg/m³, una masa molar de 17,74 Kg/kmol, y una concentración de metano igual a 14,1 % (esto significa que hay 141 moléculas de metano por 859 moléculas de agua en el metano hidratado). Es así que con esta información se puede determinar el volumen de gas en el metano hidratado [10].

 $\frac{913}{17,74} = 51,45$ kmol de hidrato, de los cuales 7,257 kmol son de metano.

La ley de los gases ideales puede ser usada para calcular el volumen de gas cuando se expande hasta alcanzar condiciones estándar es decir 15°C y 1 atm (101,325kPa).

$$V = \frac{nRT}{P} = \frac{(7,257)(8,314)(15+273)}{101,325} = 171,55 \text{ m}^3$$
(17)

Por lo que 1 m³ de hidrato contiene cerca de 170 m³ de gas metano a condiciones de presión y temperatura estándar, es decir 15°C y 1 atm (ver referencia [11] del Capítulo III).

14. Bibliografía

[1]. Carlos Giraldo and Matthew Clarke (2005), Modelling of methane gas hydrate incipient conditions via translated trebble-bishnoi-salim equation of state, Department of Chemical and Petroleum Engineering, The University of Calgary, Canada.

[2]. Brad Tomer, Hugh Guthrie, and Tom Mroz U.S (2001), A collaborative approach to methane hydrate research and development activities, Department of Energy Technology Laboratory and Ray Boswell, EG&G Services, Offshore Technology Conference held in Huston Texas.

[3]. Pismaniye Aslanlari, George Alexander, Masoud Almarri, Esra Eren, Elise Fox, Deepa Narayanan, with contribution from Pradeep Indrakanti, Ramya Venkataraman (2004), An assessment of methane hydrate recovery and processing at hydrate ridge, FSc 503, 53 pages.

[4]. Michael D Max et al (2006), Natural gas hydrate: a diagenetic economic mineral resource, Economic Geology of Natural Gas hydrate, 131 – 190.

[5] Kambiz Nazridoust, Goodarz Ahmadi (2006), Computational modeling of methane hydrate dissociation in sandstone core, Chemical Engineering Science 62(2007) 6155 - 6177.

[6]. Mohamend Iqbal Pallipurath (2007), Dissociation of hydrate marine sediment, Oil and Gas Business, 18 pages. <u>http://www.ogbus.ru/eng/</u>.

[7]. Rui Sun, Zhenhao Duan (2007), An accurate model to predict the thermodynamics stability of methane hydrate and methane solubility in marine environments, Chemical Geology 244 (2007) 248-262.

[8]. Devinder Mahajan - Charles E, Taylor - G. Ali Mansoori (2007), An introduction to natural gas hydrate/clathate: the major organic carbon reserve of the earth. Journal of Petroleum Science and Engineering 56 (2007) 1 - 8.

[9] Carolyn A. Koh, Amadeu K. Sum, E. Dendy Sloan (2012), State of art: natural gas hydrates as natural resource, Journal of Natural Gas Science and Engineering xxx (2012) 1-7. doi:10.1016/j.jngse.2012.01.005.

[10] John Carroll (2009), Natural gas hydrates – a guide for engineers. Gulf Professional Publishing, an imprint of Elsevier. ISBN: 978-0-7506-8490-3.

[11] Beaudoin, Y. C., Dallimore, S. R., and Boswell, R. (2014), Frozen Heat: A UNEP Global Outlook on Methane Gas Hydrates. Volume 2. United Nations Environment Programme, GRID-Arendal. ISBN: 978-92-807-3319-8.

[12] Jang, J., and J. C. Santamarina (2011), Recoverable gas from hydrate-bearing sediments: Pore network model simulation and macroscale analyses, J. Geophys. Res., 116, B08202, doi:10.1029/2010JB007841.

[13] Jong-Won Jung and J. Carlos Santamarina (2012), Hydrate formation and growth in pores, Journal of Crystal Growth 345, pag 61–68. doi:10.1016/j.jcrysgro.2012.01.056.

[14] Stephan A. Klapp, Susanne Hemes, Helmut Klein, Gerhard Bohrmann, Ian MacDonald and Werner F. Kuhs (2010), Grain size measurements of natural gas hydrates, Journal of Marine Geology 274, pag 85–94. doi:10.1016/j.margeo.2010.03.007.

[15] Dai, S., J. C. Santamarina, W. F. Waite, and T. J. Kneafsey (2012), Hydrate morphology: Physical properties of sands with patchy hydrate saturation, J. Geophys. Res., 117, B11205, doi:10.1029/2012JB009667.

[16] W. F. Waite, J. C. Santamarina, D. D. Cortes, B. Dugan, D. N. Espinoza, J. Germaine, J. Jang, J. W. Jung, T. J. Kneafsey, H. Shin, K. Soga, W. J. Winters, and T.-S. Yun (2009), Physical properties of hydrate-bearing sediments, Rev. Geophys., 47, RG4003, doi:10.1029/2008RG000279.

II. Ensayos de laboratorio y la superficie de fluencia

Este Capítulo contiene las bases teóricas necesarias para la definición del modelo CamClay, que basado en tres parámetros geomecánicos permite esbozar la superficie de fluencia que será impuesta al material analizado y que se supondrá válida para el caso en estudio. Los parámetros necesarios para definir la superficie de fluencia bajo la suposición de validez del modelo CamClay, son obtenidos de pruebas de Corte Directo y pruebas de Compresión Unidimensional sin deformación radial; estas pruebas son simuladas en el Capítulo IV con la ayuda del Método de los Elementos Discretos (DEM), cuyas bases se exponen en el Capítulo III. Adicionalmente en el presente Capítulo se exponen algunos resultados de pruebas de laboratorio sobre muestras reales, las cuales son útiles para seguir formando el marco de referencia sobre el cual se realizan las simulaciones numéricas.

1. Superficie de fluencia

Cuando un material granular es sometido a un proceso de carga, llegará el momento en el cual se alcanza un punto en la curva esfuerzo deformación, donde se podrá decir que el material ha iniciado a presentar la fluencia. En la Figura II-1, se señala con un circulo la zona donde la muestra presenta en mayor medida deformaciones plásticas y podría decirse que en dicha zona se ha dado inicio a la fluencia del material.

En materiales granulares como el suelo, el inicio de la fluencia para un material que se somete a algún proceso de carga, puede ubicase al analizar la evolución de las variables que influyen en mayor medida en la respuesta presentada por el medio granular. Es así que variables como la evolución de la dilatancia, la contracción², el cambio en la presión de poros³ y la evolución del esfuerzo cortante, ver Figura II-2, pueden ser usados como indicativos del inicio de la fluencia. Por ejemplo en la figura II-1 se observa que después del inicio de la fluencia el esfuerzo cortante varia muy poco con el aumento en la deformación del material, y en la Figura II-2 se observa que

² La dilatancia se asocia con la tendencia de una partícula a "subirse" o escalar las partículas vecinas en un proceso de corte de un medio granular, y la contracción se asocia a la tendencia de las partículas a "bajarse" para ocupar los espacios entre las partículas vecinas.

³ La presión que se desarrolla en el agua presente en los espacios existentes entre las partículas del medio granular, es llamada presión de poros.

la presión de poros empieza a disminuir cuando se da inicio a la fluencia del material granular.

Figura II-1: Ensayo Triaxial Monotónico (color naranja), y ensayo Triaxial Dinámico (Color rojo). Velocidad de deformación axial 0.0055 mm/s. Amplitud de carga para el ensayo Triaxial Dinámico entre (0.01-0.06) KN



Fuente: Amaya [12].

Figura II-2: Comportamiento del incremento de presión de poros (Kpa), para el ensayo Triaxial Monotónico (color naranja), y para el ensayo Triaxial Dinámico (color gris)



Fuente: Amaya [12].

La inclusión de la Figura II-2, busca que el lector no olvide la importancia de la presión que se desarrolla en el agua presente en los espacios existentes entre las partículas del medio granular, la cual es llamada presión de poros, sin embargo se aclara que para la presente investigación se asumirá que no se presenta cambio de fase del hidrato y por tal razón la presión de poros como variable de análisis puede ser excluida.

Al darle un último vistazo a la Figura II-2, es importante resaltar que esta grafica representa el comportamiento de la presión de poros para un material elaborado en laboratorio y saturado con agua líquida. De igual manera se observa que la relación entre la presión de poros y la deformación puede ser muy compleja, aun cuando el agua se considera incompresible para el caso de estudio mostrado en la Figura II-2, y que de estar presente dicha variable, cualquier modelación numérica en la que se emplee el Método de los Elementos Discretos (DEM), y que pretenda incluir el cambio de fase del hidrato, deberá incluir modelos numéricos capaces de evaluar el flujo y la presión del metano en los poros, y no podrá evitar el uso de partículas irregulares y en lo posible deformables.

La dependencia existente entre el tensor de esfuerzos aplicado al medio granular y el inicio de la fluencia del material, es un aspecto que ha sido ampliamente discutido en la literatura académica [11], donde se han definido superficies de fluencia para suelos como la esquematizada en la Figura II-3.



Figura II-3: Esquema de la superficie de fluencia para un material granular.

Fuente: David M. Wood [11]

La superficie de fluencia típica de las mezclas de arena e hidrato aún no ha sido reportada y aunque con este trabajo se impone a la mezcla de área e hidrato la fracción de la superficie de fluencia que puede representarse con la ayuda del modelo Camclay, y los tres parámetros geomecánicos⁴ necesarios para calcular sus componentes de deformación elástica y plástica, dicha fracción artificial de la superficie de fluencia debe ser tomada como una aproximación rustica a la superficie real, pero a través de la cual se podrá estudiar algunas tendencias generales de comportamiento.

La superficie de fluencia presentada en la Figura II-3, se esboza en un espacio definido por el esfuerzo efectivo normal promedio⁵ p', el esfuerzo cortante⁶ q y el volumen especifico⁷ v; y se supone que los puntos coordenados ubicados bajo la superficie o los puntos coordenados que hacen parte de la misma, son estados posibles del material, sin embargo aquellos puntos coordenados que se ubiquen sobre la superficie de fluencia, sin hacer parte de la misma, son catalogados como estados no posibles del material.

Como se puede ver en la Figura II-3 el sector de la superficie de fluencia representado por el modelo Camclay es acotado por la línea del estado crítico y la línea de compresión virgen isotrópica, esta última definida en el plano p', v sin componente sobre el eje q. El modelo CamClay supone que bajo la superficie de fluencia el material presenta solo deformaciones elásticas cuando se somete a un proceso de carga, y que cuando los tres parámetros que definen los ejes coordenados, alcanzan la superficie de fluencia se presentaran deformaciones plásticas y elásticas. Desde el punto de vista experimental, la superficie de fluencia presentada en la Figura 2-3, puede ser obtenida en su totalidad sometiendo muestras del medio granular a pruebas Triaxial de diversos tipos.

⁴ Estos parámetros geomecánicos son el ángulo de fricción, la pendiente de la línea de compresión virgen y la pendiente de la línea de recompresión.

⁵ El esfuerzo efectivo normal promedio p se define como el promedio simple entre los esfuerzos σ_x , σ_y y σ_z y representa la parte del tensor de esfuerzos que genera cambios volumétricos en la muestra.

⁶ El esfuerzo cortante *q* representa la parte del tensor de esfuerzos que genera distorsión de la muestra sin cambios de volumen.

⁷ El volumen especifico v se define como 1+e, donde e es la relación de vacíos, la cual a su vez es la relación entre el volumen de vacíos promedio que existe entre un grupo de partículas y el volumen del material solido de dicho grupo de partículas.

2. El Ensayo Triaxial

Se conoce como ensayo Triaxial aquel tipo de ensayo de laboratorio mediante el cual una muestra de material puede ser sometida a un proceso de carga tridimensional, como el esquematizado en la Figura II-4. En las pruebas Triaxiales convencionales es común que el esfuerzo principal intermedio ($\sigma_2 = \sigma_x$) sea igual al esfuerzo principal menor ($\sigma_3 = \sigma_y$), o al mayor ($\sigma_1 = \sigma_z$) y que los esfuerzos cortantes sobre las paredes de la muestra sean tomados como cero, ver Figura II-4.

Esta particularidad de la prueba Triaxial convencional, resulta ser una gran ventaja al momento de representar matemáticamente lo que en promedio sucede al interior de la muestra durante el proceso de carga, lo cual se puede lograr con la ayuda del círculo de Mohr que se presenta en la Figura II-5, y los parámetros que definen su envolvente conocidos como cohesión y ángulo de fricción $c \& \phi$, que respectivamente representan el valor del esfuerzo cortante cuando el esfuerzo normal es nulo, y la pendiente de dicha envolvente.

Durante la ejecución de una prueba Triaxial convencional, el material puede ser llevado a la falla empleando dos procedimientos; compresión Triaxial y extensión Triaxial, siendo el más común el primero de ellos, el cual generalmente es ejecutado en tres modalidades, la primera de ellas consiste en mantener el esfuerzo radial constante e incrementar el esfuerzo axial. La segunda modalidad de prueba, consiste en mantener el esfuerzo axial constante y disminuir el esfuerzo radial. Finalmente la tercera modalidad es una combinación de la modalidad 1 y 2.

De igual manera en una prueba Triaxial de extensión, el material puede ser llevado a la falla empleando tres modalidades. La primera de ellas consiste en mantener el esfuerzo radial constante y disminuir el esfuerzo axial. La segunda consiste en mantener constante el esfuerzo axial e incrementar el esfuerzo radial y la tercera modalidad es la combinación de la modalidad 1 y 2.



Figura II-4: Representación del tensor de esfuerzos aplicado a un medio granular a nivel macro

Fuente: Amaya [12].



Fuente: Amaya [12].

En la Figura II-5 se presentan los círculos de Mohr representativos para pruebas de compresión y extensión Triaxial, en las cuales se mantiene constante el esfuerzo en dos planos perpendiculares, por ejemplo los planos x e y (ver Figura II-4). Por otra parte cuando las muestras sometidas a pruebas de compresión Triaxial o extensión Triaxial han experimentado grandes deformaciones, a lo largo de uno de sus ejes de

simetría, que en general podrían ser superiores al 25%, es común observar que la cohesión definida por la envolvente de los círculos de Mohr resulta ser nula, y el ángulo de fricción obtenido en pruebas de compresión y extensión Triaxial llega a ser el mismo, como se observa en la Figura II-5.

2.1 Prueba de Compresión Triaxial

En una prueba de compresión Triaxial común, el esfuerzo principal mayor mediante el cual se comprime la muestra generalmente actúa a lo largo de alguno de los ejes de simetría, por ejemplo el eje **z** en la Figura II-4, y los esfuerzos de compresión principal intermedio y principal menor son iguales y actúan a lo largo de los dos ejes de simetría restantes,

$$\sigma_1 = \sigma_z \qquad \qquad \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_x = \sigma_y \qquad (1)$$

Se dice que una muestra sometida a un proceso de carga, por ejemplo una prueba de compresión Triaxial, llega al estado crítico cuando bajo corte sostenido y uniforme, la relación entre su volumen especifico (v_{CS}) y el esfuerzo efectivo normal promedio (p'_{CS}), resulta ser única, al igual que lo es la relación entre el esfuerzo cortante (q_{CS}) y el esfuerzo efectivo normal promedio (p'_{CS}) [11], como se puede observar en la Figura II-6 y la Figura II-9, donde se presenta la línea del estado crítico en planos bidimensionales.

Por otra parte se manifiesta que tal característica es indiferente al tipo de prueba Triaxial empleada para llevar el material a su estado crítico, como también se acepta que no existirá efecto alguno del estado inicial de la muestra respecto a la Línea del Estado Crítico [11], esquematizada en la Figura II-6 en el plano q, p', y dibujada a partir de los resultados de pruebas de compresión Triaxial, donde se miden los esfuerzos externos aplicados a la muestra, algunas deformaciones y los cambios de volumen que esta experimenta, hasta alcanzar los puntos **I, J, K** y **L**.



Figura II-6: (a) Líneas del Estado Crítico y Compresión Virgen Isotrópica en el plano (p',q)

En la Figura II-6 se presenta la línea de Compresión Virgen Isotrópica⁸ y la Línea del Estado Crítico, para una muestra de arcilla que aunque puede ser diferente a una muestra de arena y metano hidratado, puede ser útil para exponer algunas generalidades del estado crítico de los materiales granulares. Al observar la Figura II-6 notamos que la Línea de Compresión Virgen Isotrópica coincide con el eje p' y que los puntos **A**, **B**, **C** y **D**, hacen parte de dicha línea y no tienen componente en el eje q sobre el cual se ubican los esfuerzos cortantes.

Con ayuda de la Figura II-6, la resistencia de la muestra en el estado crítico puede ser descrita en el plano (p',q) como se presenta a continuación [11],

$$q_{CS} = M(p_{CS}) \tag{2}$$

En la expresión (2), *M* es la pendiente de la línea del estado crítico en el plano (p',q) y las dos variables restantes se miden sobre la línea del estado critico lo cual se indica mediante el subíndice CS, por otra parte el apostrofe resalta la no inclusión de la presión de poros en el cálculo de los esfuerzos. Esta expresión puede ser escrita en términos de los esfuerzos principales tal como se indica a continuación.

⁸ La línea de Compresión Virgen Isotrópica relaciona el volumen de vacíos promedio que existe entre grupos de partículas del medio granular cuando se aplica un esfuerzo isotrópico a la muestra.

$$(\sigma'_{1} - \sigma'_{3})_{CS} = M \left(\frac{\sigma'_{1} + \sigma'_{2} + \sigma'_{3}}{3} \right)_{CS}$$
 (3)

Sin embargo, en las pruebas de compresión Triaxial convencionales, el esfuerzo efectivo principal intermedio es igual al esfuerzo efectivo principal menor (σ'_2, σ'_3),

$$\left(\sigma_{1}^{'}-\sigma_{3}^{'}\right)_{CS}=M\left\{\frac{\sigma_{1}^{'}+2(\sigma_{3}^{'})}{3}\right\}_{CS}$$
(4)

De la Figura II-5,

$$\left(\frac{\sigma_1}{\sigma_3}\right)_{CS} = \frac{1 + sen(\phi_{CS})}{1 - sen(\phi_{CS})}$$
(5)

Por lo que la expresión 4, puede ser presentada como sigue,

$$M = \left\{ \frac{3\left(\frac{\sigma_{1}}{\sigma_{3}} - 1\right)}{\left(\frac{\sigma_{1}}{\sigma_{3}} + 2\right)} \right\}_{CS} = \left\{ \frac{3\left(\frac{1 + sen(\phi_{CS})}{1 - sen(\phi_{CS})} - 1\right)}{\left(\frac{1 + sen(\phi_{CS})}{1 - sen(\phi_{CS})} + 2\right)} \right\}_{CS} = \frac{6sen(\phi_{CS})}{3 - sen(\phi_{CS})}$$
(6)

En la ecuación (6) el parámetro *M* representa la pendiente de la línea del estado crítico en el plano q, p', y debe ser recordado ya que es uno de los elementos necesarios para calcular las matrices de rigidez del modelo CamClay.

3. Plasticidad

Como fue expuesto en párrafos anteriores cuando el tensor de esfuerzos aplicado al medio granular sobrepasa cierto límite, es posible que el suelo alcance la superficie de fluencia del material bajo la cual, teóricamente, cualquier trayectoria de esfuerzos produce deformaciones netamente elásticas. Por otra parte cuando la trayectoria de esfuerzos aplicada al material alcanza la superficie de fluencia, se observara el desarrollo de deformaciones elásticas y plásticas de manera simultánea.

En la Figura II-7 se presenta un esquema de una superficie de fluencia en el plano v, q, p', donde se pueden apreciar dos de las infinitas paredes elásticas que se ubican bajo dicha superficie, algunas líneas de volumen específico constante, la línea de Compresión Virgen Isotrópica, una línea de compresión virgen anisotropica y la línea del Estado Crítico.

Figura II-7: Esquema de la superficie de fluencia para un material granular en el plano (v, q, p')



Fuente: David M. Wood [11]. En el esquema se han incluido dos paredes elásticas para facilitar la interpretación de un proceso de carga.

Por otra parte en la Figura II-8 se presentan algunas rutas de esfuerzos para ensayos de compresión Triaxial que interceptan la línea del estado crítico definida en el plano (p',q). De igual manera se presenta la línea de compresión virgen isotrópica, la línea del estado crítico, una línea de compresión virgen anisotrópica, y para los volúmenes $\vartheta_w, \vartheta_x, \vartheta_y$ y ϑ_z se esquematizan algunos cortes de la superficie de fluencia en el plano (p',q), que en la Figura II-7 se identifican como líneas de volumen especifico constante. Otra vista típica de la superficie de fluencia en la Figura II-9, donde se puede apreciar la línea de compresión virgen anisotrópica, la línea del estado crítico, una línea de compresión virgen anisotrópica, y líneas de recompresión que representan a las paredes elásticas vistas en el plano v, p'.

Figura II-8: Rutas de esfuerzos en el plano (p',q), y cortes de la superficie de fluencia a volumen específico constante.



Figura II-9: (a) Líneas del Estado Crítico y Compresión Virgen Isotrópica en el plano (ϑ, q)



Fuente: Amaya [12].

La figura II-9 puede representarse convenientemente en el plano ϑ , log p', donde las líneas curvas pasan a ser líneas rectas de facilitar manejo y representación matemática. Como se observa en la Figura II-10 en el plano ϑ , log p', la línea de compresión virgen isotrópica, la línea del estado crítico y la línea de compresión virgen anisotrópica resultan ser líneas paralelas, y las paredes elásticas puede tomarse como líneas rectas paralelas entre sí.





Un ejemplo de un proceso de carga en el plano v, q, p' puede plantearse y visualizarse en las Figuras II-7, II-8 y II-10, al imaginar una muestra de suelo que se somete a un ensayo de compresión Triaxial isotrópica capaz de llevar la muestra al estado representado por el punto A. Una vez la muestra se encuentra en el punto A, la misma se ubica sobre la línea de Compresión Virgen Isotrópica⁹, donde se supone que la muestra no se encuentra sometida a esfuerzos capaces de causar su distorsión geométrica; esto bajo la suposición que el material es isotrópico. Si a la muestra ubicada en el punto A le aplicamos una etapa de descarga isotrópica donde no se

⁹ La línea de compresión virgen isotrópica hace parte de la superficie de fluencia del material.

restrinjan los cambios de volumen, el estado de la muestra podrá eventualmente alcanzar el punto 1, siguiendo para esto una ruta en el plano v, p'que viaja por la base de la pared elástica 1, y en cuyo recorrido solo se presentan deformaciones elásticas.

Si en una etapa posterior de carga la muestra ubicada en el punto 1 es sometida a un proceso de compresión unidimensional con deformación radial nula, el estado de la muestra subirá por la pared elástica 1, presentando deformaciones netamente elásticas hasta alcanzar el punto 2, el cual hace parte de la línea de compresión virgen anisotrópica¹⁰, donde se presentan en simultaneo deformaciones plásticas y elásticas. Al continuar el proceso de compresión unidimensional de la muestra con deformación radial nula, la muestra ubicada en punto 2 seguirá la línea de compresión virgen anisotrópica presentando deformaciones elásticas y plásticas hasta alcanzar el punto 3, donde podría aplicarse una última etapa de descarga hasta ubicarse en el punto 4.

Al seguir el estado de la muestra sometida al proceso de carga imaginario planteado en párrafos anteriores, surge la pregunta de cómo estimar las deformaciones elásticas y plásticas que experimenta el material en el proceso de carga, por lo que una posible respuesta seria plantear un modelo elásto-plástico que logre representar el proceso físico analizado. Para la construcción de un modelo elásto-plástico es necesario separar el cambio total de volumen ($\Delta\vartheta$) en sus componentes elástico $\Delta\vartheta^e$ y plástico $\Delta\vartheta^p$ [11].

$$\Delta \mathcal{G} = \Delta \mathcal{G}^e + \Delta \mathcal{G}^p \tag{7}$$

La ecuación de la línea de re-compresión en el plano (ϑ, p') , líneas 1, 2, 3 y 4 de la Figura II-10 es,

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_k - k \cdot \ln(p') \tag{8}$$

El cambio de volumen irrecuperable ($\Delta \vartheta^p$), al pasar de una línea de recompresión a otra, por ejemplo al pasar de la línea de re-compresión 3 a la 4 es,

$$\Delta \mathcal{G}^{p} = \Delta \mathcal{G}_{k} = \Delta \mathcal{G}_{k2} - \Delta \mathcal{G}_{k1} \tag{9}$$

¹⁰ La línea de compresión virgen anisotrópica hace parte de la superficie de fluencia del material.

El cambio de volumen irrecuperable $(\Delta \vartheta^p)$, también puede ser obtenido al observar la gráfica de volumen vs esfuerzo normal promedio p', alrededor de los puntos en los cuales las líneas de re-compresión (líneas 1, 2, 3 y 4 de la Figura II-7), interceptan la línea de compresión virgen isotrópica [11]. En este punto es importante mencionar que la pendiente de la línea de compresión isotrópica es λ y la pendiente de la línea de re-compresión isotrópica es λ y la pendiente de la línea de re-

De esta manera el cambio de volumen irrecuperable $(\Delta \vartheta^p)$ al pasar de una línea de recompresión L_1 a otra línea de recompresión L_2 , puede ser estimado al evaluar el cambio de volumen remanente cuando el esfuerzo normal promedio p' es incrementado desde un punto p'_{01} por ejemplo el punto **B** en la Figura II-7, al punto **D** y luego reducido a p'_{01} , a lo largo de la línea de re-compresión 4 [11], lo cual se expresa matemáticamente de la siguiente manera.

$$\Delta \mathcal{G}^{p} = -\lambda \ln \left(\frac{p'_{02}}{p'_{01}} \right) + k \ln \left(\frac{p'_{02}}{p'_{01}} \right)$$
(10)

$$\Delta \mathcal{G}^{p} = -(\lambda - k) \ln\left(\frac{p'_{02}}{p'_{01}}\right)$$
(11)

El primer término de la ecuación 10, representa el cambio total de volumen que ocurre cuando el esfuerzo normal promedio p' es incrementado desde p'_{01} (punto **B**) a p'_{02} (punto **D**). El segundo término es el cambio de volumen recuperable cuando el esfuerzo normal promedio p' es reducido de p'_{02} a p'_{01} a lo largo de la línea de recompresión 4. En el límite la Expresión (11) da por resultado [11],

$$\delta \mathcal{G}^{p} = -(\lambda - k) \frac{\delta p'_{0}}{p'_{0}}$$
(12)

Sabemos que un incremento en el volumen específico $\delta \vartheta$, asociado a esfuerzos de compresión, produce un incremento de deformación volumétrica elástica y plástica. En esta ecuación el subíndice está relacionado con los esfuerzos de compresión.

$$\delta \varepsilon_p = \frac{-\delta \mathcal{G}}{\mathcal{G}} \tag{13}$$

de la expresión (11) y (13), es posible obtener la deformación volumétrica plástica. En esta ecuación el superíndice indica que la deformación calculada es plástica.

$$\delta \varepsilon_p^p = (\lambda - k) \frac{\delta p'_0}{\vartheta \cdot p'_0} \tag{14}$$

Las ecuaciones (12) y (14) para cambios de volumen plástico son muy similares a las expresiones para el cambio de volumen elástico dado por la ecuación 8,

$$\delta \mathcal{G}^e = -k \frac{\delta p'}{p'} \tag{15}$$

$$\delta \varepsilon_p^e = -k \frac{\delta p'}{\mathcal{G} \cdot p'} \tag{16}$$

Sin embargo los factores son diferentes y mientras los cambios de volumen elástico ocurren siempre que el esfuerzo normal promedio p' cambia, los cambios de volumen plástico ocurren solamente cuando el tamaño de la superficie de fluencia cambia, esto es cuando p'_0 cambia (la superficie de fluencia cambia de tamaño a lo largo de la línea de compresión isotrópica o líneas similares) [11]. El incremento total de deformación volumétrica es la suma de los componentes elásticos y plásticos,

$$\delta \varepsilon_p = \delta \varepsilon_p^e + \delta \varepsilon_p^p \tag{17}$$

$$\delta \varepsilon_{p} = k \frac{\delta p'}{\vartheta \cdot p'} + (\lambda - k) \frac{\delta p'_{0}}{\vartheta \cdot p'_{0}}$$
(18)

el cambio total de volumen especifico

$$\delta \mathcal{G} = \delta \mathcal{G}^e + \delta \mathcal{G}^p \tag{19}$$

$$\delta \vartheta = -k \frac{\delta p'}{p'} - (\lambda - k) \frac{\delta p'_0}{p'_0}$$
(20)

Cuando el suelo es sometido a un proceso de consolidación unidimensional es posible modificar el tamaño la superficie de fluencia del material logrando que p' sea igual a p'_0 [11], por lo que el incremento de deformación volumétrica total es,

$$\delta \varepsilon_{p} = \lambda \frac{\delta p'}{\mathcal{G} \cdot p'} \tag{21}$$

y el cambio total de volumen especifico es,

$$\delta \vartheta = \lambda \, \frac{\delta p'}{p'} \tag{22}$$

que al ser integrada, da por resultado la ecuación de la línea de compresión normal.

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_{\lambda} - \lambda \ln(p') \tag{23}$$

Hasta el momento las deformaciones volumétricas plásticas han sido asociadas con cambios en el tamaño de la superficie de fluencia. Estos cambios en el tamaño de la superficie de fluencia en un material pueden producirse por medio de un sin número de rutas de esfuerzos. Sin embargo el cambio de volumen recuperable asociado con cada una de las rutas impuestas para alcanzar un nuevo tamaño de la superficie de fluencia es diferente, ya que el cambio de esfuerzo normal promedio p' es diferente en cada una de las trayectorias [11]. Por otra parte el cambio de volumen irrecuperable al generar un cambio de tamaño de la superficie de fluencia, es el mismo sin importar la ruta que se siga, por lo que de forma sucinta se podría decir que el cambio en p'_0 para dos tamaños de la superficie de fluencia es el mismo sin importar por medio de que ruta de esfuerzos se genera dicho cambio de tamaño [11].

La descripción de la deformación volumétrica plástica provee solamente una descripción parcial de la deformación plástica, es así que se hace necesario calcular la magnitud de cualquier deformación cortante plástica que pueda ocurrir [11].

3.1 El Bloque Friccional

El comportamiento de un bloque deslizándose sobre una superficie rugosa provee una analogía del comportamiento plástico de materiales que puede ser de ayuda para entender la teoría de la plasticidad. Un bloque sometido a una carga normal *P* y sujeto a una carga de corte Q_x en la dirección *x*, se desliza cuando $Q_x = \mu P$, donde μ es el coeficiente de fricción. Si el bloque es sujeto a cargas de corte Q_x y Q_y , ortogonales entre si y contenidas en un plano cuya normal es paralela con la dirección de *P*, se tendrá deslizamiento del bloque cuando la resultante de las cargas de corte sea igual a μP [11],

$$\sqrt{Q_x^2 + Q_y^2} = \mu P \qquad \qquad f = Q_x^2 + Q_y^2 - \mu^2 P^2 = 0 \qquad (24)$$

La ecuación 24, describe una superficie de deslizamiento para el bloque en el espacio $P: Q_x: Q_y$, con forma de un cono cuyo eje de simetría es el eje P. Una sección a través de esta superficie de deslizamiento con $Q_y = 0$, produce una línea recta y una sección a un valor de P constante produce un circulo de radio μP . La ecuación 24 introduce una función de deslizamiento f. Si f < 0 el bloque permanece en reposo, si f = 0 el bloque se desliza, pero si f > 0 se obtiene una situación inadmisible [11].

Aunque seguramente la deformación elástica que se presente antes de que el bloque se deslice es pequeña, siempre estará presente. En el plano $P: Q_x$, el movimiento del bloque puede ser indicado por un vector de deslizamiento cuyas componentes son los desplazamientos $\delta z^s y \, \delta x^s$, donde el superíndice *s* indica que la contribución elástica al desplazamiento total ha sido sustraída; el desplazamiento en la dirección *z* es paralelo con la dirección de la carga normal *P*.

Suponiendo que el desplazamiento en la dirección z es nulo, el vector de deslizamiento es paralelo a la dirección de Q_x [11], como se puede apreciar en la Figura II-11.

Figura II-11: Cargas y desplazamientos para el bloque friccional. a). Sección a través de la superficie de deslizamiento (línea inclinada solida) y potencial de deslizamiento para $Q_y = 0$ (líneas horizontales no continuas). b). Sección a través de la superficie de fluencia y potencial de deslizamiento para *P* constante, con ruta de carga OABC



Fuente: David M. Wood [11].

Si después de que ocurre el deslizamiento en la dirección x, la carga de corte Q_x es reducida a $\mu P/2$ sin cambio en P y un incremento de carga de corte Q_y se aplica al sistema, se tendrá deslizamiento cuando $Q_y = \sqrt{3}\mu P/2$. Aunque el deslizamiento sea inducido por incrementos en la carga de corte Q_y , el deslizamiento se dará en la dirección de la resultante de las cargas de corte aplicadas al sistema, así que un vector con componentes de desplazamiento por deslizamiento $\delta x^s, \delta y^s$ es siempre normal a la superficie de deslizamiento en el plano Q_x, Q_y [11]

De lo anteriormente expuesto, se puede concluir que ocurren movimientos irrecuperables en la dirección x aunque el deslizamiento sea inducido por incrementos en la carga de corte en la dirección y. Siendo este un ejemplo de la dependencia que existe entre las componentes de deformación irrecuperable y el estado de esfuerzos al cual la deformación irrecuperable está ocurriendo y no de la ruta por la cual este estado de esfuerzos fue alcanzado [11]. Una segunda función puede ser introducida donde κ es una nueva variable.

$$g = Q_x^2 + Q_y^2 - k^2 = 0$$
(25)

Está función puede ser descrita como un potencial de deslizamiento ya que las cantidades relativas de desplazamiento por deslizamiento que ocurren en cada dirección x, y, z pueden ser encontradas por diferenciación de la función g con respecto a cada una de las cargas correspondientes [11].

$$\delta x^{s} = X \frac{\partial g}{\partial Q_{x}} = X 2 Q_{x} \qquad \delta y^{s} = X \frac{\partial g}{\partial Q_{y}} = X 2 Q_{y} \qquad \delta z^{s} = X \frac{\partial g}{\partial P} = 0 \quad (26)$$

La cantidad *X* es un factor escalar que tiene en consideración la magnitud relativa de las tres componentes de desplazamiento por deslizamiento. Para cualquier valor de κ las Ecuaciones 26 describen un cilindro en el espacio *P*: Q_x : Q_y , centrado en el eje *P* [11].

3.2 Potencial Plástico

Al recordar el ejemplo del bloque friccional sometido a cargas que tratan de generar su deslizamiento, se puede aceptar que existe dependencia entre las deformaciones plásticas y el estado de esfuerzos en el cual tiene inicio la fluencia, la cual puede ocurrir bajo un número infinito de combinaciones de esfuerzos.

Si el plano de esfuerzos p',q, se hace coincidir con un plano de incrementos de deformación plástica como se muestra en la Figura II-12a, para cada combinación de esfuerzos que de inicio a la fluencia es posible dibujar un vector de deformaciones plásticas y una línea ortogonal a dicho vector que pase por el punto donde tubo inicio la fluencia (línea AB).

Es así que si muestras idénticas de un mismo material pudieran ser llevadas a la fluencia a través de la aplicación de diferentes tensores de esfuerzos, podrían obtenerse un gran número de líneas ortogonales a los vectores de deformaciones plásticas, que al ser unidas esbozaran curvas que llamaremos curvas de potencial plástico, las cuales podrían no coincidir geométricamente con las curvas de fluencia del material definidas en el plano p',q, como se puede ver Figura II-12b.

Figura II-12: a). Vectores incrementales de deformación plástica normales a curvas de potencial plástico (líneas no continuas). b). Familia de curvas de potencial plástico y familia de curvas de fluencia (líneas continuas)



Fuente: David M. Wood [11].

3.3 Normalidad o Flujo Asociado

Para definir un modelo de comportamiento del suelo se requiere información acerca de las curvas de potencial plástico y las curvas de fluencia [11], las cuales han sido representadas en el plano p', q, en la Figura II-12 y II-8 respectivamente.

Algunos resultados de ensayos de laboratorio, muestran que las curvas de potencial plástico y las curvas de fluencia para algunos metales como el cobre coinciden, sin embargo en el caso del bloque friccional presentado anteriormente las superficies de deslizamiento son conos pero el potencial de deslizamiento es un cilindro, por lo que dichas curvas no coinciden cuando son evaluadas en una sección ortogonal al eje P, para un valor constante de P.

El modelo CamClay supone que las curvas de potencial plástico y las curvas de fluencia coinciden, con lo que se logra reducir a uno, el número de funciones que describen la respuesta plástica del material. En este caso donde las curvas de potencial plástico y las curvas de fluencia coinciden, se dice que el material "obedece" el postulado de la normalidad, o que el mismo sigue una ley de flujo asociada. Sin embargo desde el ejemplo del bloque friccional se puede ver que para muchos materiales es muy posible que las curvas de potencial plástico y las curvas de fluencia no coincidan [11].

3.4 Relación entre esfuerzos e incrementos de deformación plástica

Supongamos que el medio granular tiene una superficie de fluencia $f(p',q,p'_0)$, que define el límite de una región en el plano de esfuerzos p',q, al interior de la cual las deformaciones generadas por cambios en las componentes del tensor de esfuerzos, son únicamente deformaciones elásticas (recordemos que P'_0 controla el tamaño de la curva de fluencia). Adicionalmente supongamos que las curvas de potencial plástico para el material están dadas por $g(p',q,\zeta)$, donde el parámetro ζ controla el tamaño de las mencionadas curvas. El modelo CamClay supone que el vector conformado por los incrementos de deformación plástica asociado a una curva de potencial plástico, es colineal con la normal de la respectiva curva de fluencia en el estado de esfuerzos corriente, y que sus componentes pueden ser halladas como sigue [11],

$$\delta \varepsilon_p^p = x \frac{\partial g}{\partial p'} \qquad \qquad \delta \varepsilon_q^p = x \frac{\partial g}{\partial q} \qquad (27^{a,b})$$

donde *x* es un factor escalar que será derivado de las características de endurecimiento que se supongan para el material. Continuando con las suposiciones, aceptemos que el cambio en el tamaño de la superficie de fluencia (que es el cambio en P'_0), está relacionado únicamente con incrementos en la deformación volumétrica plástica $\delta \varepsilon_p^p$ e incrementos en la deformación cortante plástica $\delta \varepsilon_p^p$, de acuerdo a la siguiente regla de endurecimiento [11],

$$\delta p_{0}' = \frac{\partial p_{0}'}{\partial \varepsilon_{p}^{p}} \delta \varepsilon_{p}^{p} + \frac{\partial p_{0}'}{\partial \varepsilon_{q}^{p}} \delta \varepsilon_{q}^{p}$$
(28)

Por otra parte, la forma diferencial de la superficie de fluencia es [11],

$$\frac{\partial f}{\partial p'} \delta p' + \frac{\partial f}{\partial q} \delta q + \frac{\partial f}{\partial p'_0} \delta p'_0 = 0$$
⁽²⁹⁾

combinando 27, 28 y 29 se llega a una expresión para el cálculo del factor x contenido en las expresiones 27 [11],

$$x = \frac{-\left(\frac{\partial f}{\partial p'} \delta p' + \frac{\partial f}{\partial q} \delta q\right)}{\frac{\partial f}{\partial p'_{0}} \left(\frac{\partial p'_{0}}{\partial \varepsilon_{p}} \frac{\partial g}{\partial p'} + \frac{\partial p'_{0}}{\partial \varepsilon_{q}} \frac{\partial g}{\partial q}\right)}$$
(30)

sustituyendo este resultado en la expresión 27, obtenemos [11],

$$\begin{bmatrix} \delta \varepsilon_p^p \\ \delta \varepsilon_q^p \end{bmatrix} = \frac{-1}{\begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial p_0} \left(\frac{\partial p_0^{'}}{\partial \varepsilon_p^p} \frac{\partial g}{\partial p'} + \frac{\partial p_0^{'}}{\partial \varepsilon_q^p} \frac{\partial g}{\partial q} \right) \end{bmatrix}} \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial p'} \frac{\partial g}{\partial p'} & \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p'} \\ \frac{\partial f}{\partial p'} \frac{\partial g}{\partial q} & \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial q} \end{bmatrix}}{\begin{bmatrix} \delta p' \\ \delta q \end{bmatrix}}$$
(31)

4. El Modelo CamClay

En este punto ya es claro que para poder definir completamente un modelo elástoplástico es necesario contar con las propiedades elásticas del material, su superficie de fluencia, la superficie de potencial plástico y un modelo de endurecimiento o ablandamiento. Como fue expuesto en la ecuación 16, los cambios recuperables de volumen están controlados por los cambios en el esfuerzo efectivo promedio,

$$\delta \varepsilon_{p'}^{e} = k \frac{\delta p'}{\upsilon p'}$$
 donde $K' = \frac{\upsilon p'}{k}$ (32ª,b)

lo que implica una relación lineal en el plano de compresión p',q, entre el volumen específico y el logaritmo del esfuerzo promedio p' durante ciclos de recarga descarga y dentro de la zona limitada por la superficie de fluencia. También se asume que los cambios recuperables en la deformación cortante dados por cambios en el esfuerzo desviador q son representados por,

$$\delta \varepsilon_q^e = \frac{\delta q}{3G'} \tag{33}$$

donde el valor del módulo cortante G' se supone constante. En el modelo CamClay se supone que la superficie de fluencia es un elipsoide que al ser visto en el plano de esfuerzos p', q resulta ser una elipse.

Para un modelo isotrópico la elipse que representa la superficie de fluencia en el modelo CamClay está centrada en el eje de las abscisas, eje p'. Por otra parte para materiales granulares es conveniente hacer que la elipse descrita pase por el origen del sistema coordenado de referencia, lo que es razonable ya que las partículas del suelo no están cementadas al alcanzar la mencionada superficie de fluencia, por lo que al imponerse esfuerzos de tracción sobre las partículas se presentaran deformaciones plásticas. La ecuación de la elipse puede ser escrita como sigue,

$$\frac{p'}{p_0} = \frac{M^2}{M^2 + \eta^2} \qquad \text{o} \qquad 1 = \left(\frac{M^2}{M^2 + \eta^2}\right) \frac{p_0}{p'} \qquad \text{donde} \qquad \eta = q/p' \qquad (33 \text{ a.b.c})$$

Está ecuación describe un grupo de elipses que pasan por el origen del sistema coordenado de referencia en el plano p', q, cuya forma es controlada por el parámetro M, el cual representa la pendiente de la línea del estado crítico que se presenta en la Figura 2-6. Por otra parte el tamaño de las elipses es definido por el valor de p'_0 .

Cuando el medio granular está fluyendo, el cambio en tamaño de la superficie de fluencia está relacionada con cambios en los esfuerzos p'y q a través de la siguiente ecuación diferencial [11]. (La ecuación la 34 ^a, puede obtenerse al derivar la ecuación 33 ^a, donde p'_0 , $p' y \eta$ son variables, reordenando términos y una vez calculada la derivada, usando la ecuación 33^b para simplificar).

$$\frac{\delta p'}{p'} + \frac{2\eta \delta \eta}{M^2 + \eta^2} - \frac{\delta p_0}{p_0} = 0 \quad o \quad \left(\frac{M^2 - \eta^2}{M^2 + \eta^2}\right) \frac{\delta p'}{p'} + \left(\frac{2\eta}{M^2 + \eta^2}\right) \frac{\delta q}{p'} - \frac{\delta p_0}{p_0} = 0 \quad (34^{a,b})$$

La expresión (33^a) puede ser escrita como sigue (ver ecuación 24). (Igualando a cero y despejando).

$$f = q^2 - M^2 \Big[p' \Big(p_0' - p' \Big) \Big] = 0$$
(35)

Como se supone que el material obedece la condición de normalidad (f = g), se tendrá que la familia de curvas representando el potencial plástico están dadas por,

$$g = q^2 - M^2 \Big[p' \Big(p'_0 - p' \Big) \Big] = 0$$
(36)

Según las ecuaciones 27, el vector de incrementos de deformación plástica es ortogonal a las curvas de potencial plástico (f = g). Por lo que,

$$\frac{\delta \varepsilon_p^p}{\delta \varepsilon_q^p} = \frac{x \frac{\partial g}{\partial p'}}{x \frac{\partial g}{\partial q}} = \frac{\partial g / \partial p'}{\partial g / \partial q} = \frac{M^2 (2p' - p_0')}{2q} = \frac{M^2 - \eta^2}{2\eta}$$
(37)

también se supone que la superficie de fluencia asumida se expande sin variar su forma, que el tamaño es controlado por el esfuerzo p'_0 y que la expansión de la superficie de fluencia y el endurecimiento, están relacionados con la compresión normal del suelo [11]. Así mismo se supone una relación lineal entre volumen específico y el logaritmo del esfuerzo efectivo promedio p'_0 durante la compresión normal isotrópica del suelo, ver Figura 2-10,

$$\upsilon = N - \lambda \ln(p_0)$$
(38)

Donde *N* es el valor del volumen específico ϑ , para un esfuerzo p'_0 de por ejemplo 1 Kpa; volumen que será útil para especificar la posición de la línea de compresión normal isotrópica en el plano de compresión p', ϑ . Recordando la ecuación 14, y el contexto en que esta fue expuesta, podemos decir que la deformación volumétrica plástica está dada por,

$$\delta \varepsilon_p^p = \left[\frac{(\lambda - k)}{\upsilon}\right] \frac{\delta p_0}{p_0}$$
(39)

y los elementos de la relación de endurecimiento estarán dados por,

$$\frac{\partial p_0}{\partial \varepsilon_p^p} = \frac{\nu p_0}{\lambda - k} \quad \& \quad \frac{\partial p_0}{\partial \varepsilon_q^p} = 0 \tag{40}$$

con estas expresiones tenemos el modelo completo [11]. Comparando la ecuación 34^b con la forma diferencial de la superficie de fluencia (ecuación 29), y remplazando en 31,

$$\begin{bmatrix} \delta \varepsilon_p^p \\ \delta \varepsilon_q^p \end{bmatrix} = \frac{(\lambda - k)}{\upsilon p' (M^2 + \eta^2)} \begin{bmatrix} (M^2 - \eta^2) & 2\eta \\ 2\eta & 4\eta^2 / (M^2 - \eta^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p' \\ \delta q \end{bmatrix}$$
(41)

Está expresión opera solamente si la deformación plástica está ocurriendo. Por otra parte, la deformación elástica será,

$$\begin{bmatrix} \delta \varepsilon_p^e \\ \delta \varepsilon_q^e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \kappa / \upsilon p' & 0 \\ 0 & 1/3G' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p' \\ \delta q \end{bmatrix}$$
(42)

5. Resistencia al corte de mezclas de sedimento y metano hidratado

El comportamiento mecánico de mezclas de sedimento y metano hidratado que son sometidas a procesos de carga donde se inducen grandes deformaciones, tiene gran importancia para la estabilidad del fondo marino y las operaciones mineras que se adelantan en el mismo [1]. Por otra parte uno de los rasgos que mejor describe el comportamiento de estos materiales, es la relación esfuerzo deformación que se obtiene en las pruebas de laboratorio, razón por la cual en el presente capítulo se exponen los resultados de algunas investigaciones, que en esta materia se han adelantado y reportado por la comunidad científica.

5.1 Comportamiento de mezclas de hidrato y sedimentos, reproducidas en laboratorio.

Una manera de estudiar la respuesta esfuerzo deformación de mezclas de metano hidratado y sedimentos, es tratar de reproducir dichas mezclas en laboratorio, usando para ello sedimentos con características bien definidas, cuyos vacíos son llenados con agua y gas, para posteriormente someter el conjunto a presiones y temperaturas que den lugar a la formación de hidratos. Finalmente estas muestras son llevadas a la falla a través de una etapa de carga no drenada.

Esta metodología es seguida por T. S Yun et al. [1], quienes para llenar los vacíos de la muestra utilizan Tetrahidrofurano como sustituto del metano, ya que el primero presenta mayores ventajas para la formación de hidratos en la cámara Triaxial (El Tetrahidrofurano es un líquido), en razón a su elevada miscibilidad con el agua respecto a la miscibilidad del metano en dicho líquido, lo cual facilita la preparación de la muestra. Una investigación similar pero esta vez usando gas metano fue realizada por Hyodo, M. et al [13], y sus resultados se presentan en la Figura II-13.

Figura II-13: a) Curvas esfuerzo deformación para mezclas de arena e hidrato con saturación del 0%, 50% y 100%, y presión de confinamiento de 0.03 Mpa, 0.5 Mpa y 1 Mpa [1]. **b)** Curvas esfuerzo deformación, esfuerzo efectivo de confinamiento de 3Mpa, para una arena con tres concentraciones de hidrato 0%, 26.6% y 46.7%



Fuente: Hyodo, M et al. [13].

T. S Yun et al. [1] y Hyodo, M. et al [13], logran preparar múltiples muestras con características similares en lo referente al arreglo y distribución espacial de los granos. Estas muestras son llevadas al mismo estado de esfuerzos mediante consolidación isotrópica en la cámara Triaxial, antes de ser sometidas a una etapa de saturación con hidrato, para posteriormente ser llevadas a la falla, manteniendo en esta etapa, los esfuerzos isotrópicos de confinamiento usados durante la etapa de consolidación. Es así que los mencionados autores, presentan resultados en los cuales las muestras de arena sin hidrato, exhiben endurecimiento por deformación en la etapa de corte, y presentan los siguientes rasgos generales de comportamiento, cuando la saturación con hidrato es mayor al 25%, que es el punto donde el hidrato empieza a cementar los sedimentos [4]. Algunos de estos comportamientos también son documentados por Jocelyn L.H. Grozic et al [10].

- La resistencia y rigidez de las muestras, se incrementa de manera no lineal, con el aumento en la saturación con hidrato de la muestra, lo cual es notable cuando la deformación axial es menor al 3%.
- La respuesta esfuerzo deformación de las muestras se hace menos sensible al confinamiento, a medida que la saturación con hidrato se incrementa.
- 3. La zona de la curva esfuerzo deformación anterior al punto de fluencia, presenta una alta rigidez y puede ser descrita como una zona de comportamiento elástico; esto independientemente de la presión de confinamiento y hasta alcanzar deformaciones axiales de aproximadamente 1%. Por otra parte T. S Yun et al. [1], citan referencias bibliográficas donde se presentan resultados similares para arena saturada con hielo.
- 4. Asocian el inicio de la fluencia con la fractura de las uniones de hidrato entre partículas de arena. Así mismo asocian la resistencia pico de las muestras, con el colapso global de la estructura del conjunto sedimento hidrato.
- 5. Señalan que al sobrepasar la resistencia pico, se observa ablandamiento por deformación en la muestra.
- 6. Así mismo Hyodo, M. et al [13], enfatizan que el incremento en la saturación incrementa la dilatancia a deformaciones mayores a las correspondientes con la resistencia pico de la muestra, agudiza el ablandamiento por deformación, dificulta la rotación de partículas y su deslizamiento (lo cual adicionalmente se acentúa con el confinamiento), disminuye sensiblemente la permeabilidad de la muestra, incrementa su densidad y la hace mucho más sensible a los cambios de temperatura, ya que a pesar de que las propiedades mecánicas del área no resultan ser muy sensibles a la temperatura, el hidrato si resulta ser afectado en sus propiedades físicas, mecánicas y químicas por los cambios leves en dicha variable.
- 7. En cuanto a la presión de poros, Hyodo, M. et al [13], manifiestan que al tener en cuenta la alta compresibilidad del metano en forma de gas, la presión de poros no cambiará mucho en el proceso de corte y por esta razón el ablandamiento por deformación es aproximadamente el mismo, sin embargo también manifiesta que el incremento en la saturación con hidratos trae disminución en la permeabilidad (aspecto también resaltado por [9]) ,y al no poder liberarse la presión de poros por flujo, se favorece el ablandamiento por deformación observado a grandes deformaciones, lo cual resulta ser un poco contradictorio, ya que se había dicho que la influencia de la presión de poros es menor. Esta afirmación de Hyodo, M. et al [13], es opuesta a lo publicado por Jocelyn L.H. Grozic et al [10], quienes aseguran que la disociación del hidrato, trae consigo la generación de líquido y gas, perdida de resistencia y de rigidez de la muestra y elevadas presiones de poros.

En cuanto a la rigidez y la degradación del módulo de Young (E), T. S Yun et al [1], presentan las Figuras II-14, donde se observa que la rigidez de los sedimentos sin hidratos, se incrementa con el confinamiento; sin embargo la rigidez de las muestras saturadas con hidrato, se hace poco dependiente del confinamiento, a medida que incrementa el grado de saturación con hidrato. Es así que a saturaciones de más de 50%, parece perder relevancia el incremento en la rigidez con el incremento en el confinamiento, como se puede ver Figura II-14.

Figura II-14: Variación del módulo secante con el confinamiento.



Fuente: Las imágenes fueron tomadas del artículo titulado "Mechanical properties of sand, silt and clay containing tetrahydrofuran hydrate" [1].

En la Figura II-15 se presentan algunos valores representativos de las pruebas realizadas por T. S Yun et al. [1], tales como la resistencia al corte pico y la rigidez secante medida al 50% del esfuerzo desviador máximo.

Hydrate Saturation S_{hyd} , %	Effective Confining Stress σ'_0 , MPa	Initial Void Ratio	Void Ratio at the End of Consolidation	Peak Measured Shear Strength q_{max} , MPa	Secant Stiffness E_{50} , MPa
0	0.03	0.61	0.60	0.12	16
0	0.5	0.61	0.60	0.79	105
0	1	0.63	0.60	1.41	275
50	0.03	0.60	0.59	1.54	413
50	0.5	0.61	0.57	1.93	405
50	1	0.61	0.56	2.71	483
100	0.03	0.58	0.59	8.01	854
100	0.5	0.60	0.58	8.77	1403
100	1	0.59	0.57	9.78	1189

Figura II-15: Valores representativos obtenidos por T. S Yun et al., para mezclas de arena e hidratos obtenidos en laboratorio

Fuente: Las imágenes fueron tomadas del artículo titulado "Mechanical properties of sand, silt and clay containing tetrahydrofuran hydrate" [1].

En investigaciones como las realizadas por Zhang Weidong et al. [5], se reportan relaciones entre el grado de saturación con hidrato de la muestra y los valores de cohesión y fricción obtenidos en pruebas Triaxial, realizadas a temperaturas cercanas a los 3.5 grados centígrados. Aunque la información reportada por Zhang Weidong et al. [5], no es muy clara en la definición de variables como la presión de confinamiento, velocidades de corte, entre otros, dicha información permite ver la tendencia general de comportamiento de parámetros como la cohesión y fricción para diferentes grados de saturación con hidrato, como se puede observar en la Figura II-16.





Fuente: Las imágenes fueron tomadas del artículo titulado "An experimental study of shear strength of gas-hydrate-bearing core samples" [5].

Jeffrey A. Priest et al. [6], y T. S Yun et al. [1], coinciden en afirmar que a partir del 40% de saturación con hidrato, éste elemento cementa los contactos entre granos de la muestra, incrementando de manera marcada la rigidez global de misma y disminuyendo su permeabilidad. Por otra parte se recuerda que algunos autores [4], señalan que los hidratos inician a cementar los sedimentos, cuando los mismos ocupan aproximadamente el 25% de sus vacíos.

El efecto que el metano hidratado tiene sobre el cambio de rigidez en las mezclas de sedimento y dicho elemento, también es estudiado por Wang Dong et al. [8], quien a través de la medición de ondas de corte y compresión en muestras reconstituidas en laboratorio (muestras construidas con tetrahidrofurano y agua), señala que parámetros como el módulo de Young y el módulo de corte a bajas deformaciones, varían hasta en un 15% con el incremento en la temperatura de la muestra sin que ocurra el cambio de fase del hidrato. Esto permite reconocer la necesidad de estudiar el efecto que

puede tener la variabilidad de la rigidez del metano hidratado, en la respuesta mecánica de la muestra.

5.2 Relación esfuerzo deformación para mezclas de metano hidratado y hielo, reproducidas en laboratorio.

Una de las investigaciones que aborda el estudio de la respuesta mecánica de mezclas de metano hidratado y agua sólida, fue desarrollada por Yanghui Li et al [3], quienes publican resultados de pruebas Triaxial realizadas sobre mezclas de metano hidratado y hielo. En estas pruebas el metano hidratado fue mezclado con hielo, garantizando que el hidrato de metano estuviera presente en cada muestra en un porcentaje del 0%, 10% y 30%. Es así que estas muestras fueron confinadas y llevadas a falla a presiones de cámara de 2.5 Mpa, 5 Mpa y 10 Mpa. (La densidad de las muestras fue de 0.9 gr/cm³ y una porosidad de 17.8 %), obteniéndose las curvas esfuerzo deformación presentadas en la Figura II-17.

Figura II-17: Relación esfuerzo desviador versus deformación axial, para mezclas de metano hidratado y saturación con hidrato del 0%, 10% y 30%.



Fuente: Las imágenes fueron tomadas del artículo titulado "Experimental Research on the Mechanical Properties of Methane Hydrate-Ice Mixtures" [3].

Según lo reportado por Yanghui Li et al. [3] y lo que se puede observar en la Figura II-17, la relación lineal entre esfuerzo desviador y deformación axial para las muestras ensayadas, se mantiene para deformaciones axiales menores al 1%, lo cual coincide con lo reportado por T. S Yun et al. [1], quienes obtienen la misma relación lineal para mezclas de sedimento y metano hidratado a deformaciones axiales menores al 1%. Según lo descrito por T. S Yun et al. [1], esta relación lineal se mantiene de manera independiente a la presión de confinamiento. Yanghui Li et al. [3], adicionalmente presentan las dos gráficas que se muestran en la Figura II-18, donde se establece la relación esfuerzo desviador versus presión de confinamiento, y la relación esfuerzo desviador versus contenido de metano hidratado para mezclas de metano hidratado y hielo.

Como se puede observar en la Figura II-18, para todos los contendidos de metano hidratado (0%, 10%, 20% y 30%) evaluados por Yanghui Li et al. [3], se tiene una relación lineal entre el esfuerzo desviador al 15% de la deformación axial y la presión de confinamiento; esta relación indica que con el incremento en la presión de confinamiento, se obtienen mayores esfuerzos desviadores. Sin embargo con el incremento en el contenido de metano hidratado y para una misma presión de confinamiento, se obtienen menores valores del esfuerzo desviador.

Figura II-18: Efecto de la presión de confinamiento y el contenido de Metano Hidratado, en el esfuerzo desviador al 15% de la deformación axial.



Fuente: Las imágenes fueron tomadas del artículo titulado "Experimental Research on the Mechanical Properties of Methane Hydrate-Ice Mixtures" [3].

Un trabajo previo publicado por Yanghui Li et al. [2], hace notable el efecto de la temperatura en la relación esfuerzo deformación para el metano hidratado, es así que en la investigación mencionada, se ha encontrado que el esfuerzo desviador para muestras llevadas a la falla, a la misma presión de confinamiento, se incrementa hasta un 50% al descender 15 grados centígrados la temperatura, y que el módulo de Young tangente en el inicio de la carga, se incrementa hasta un 30%. Estos rasgos de comportamiento se pueden observar en la Figura II-19.

Figura II-19: A). Relación entre el esfuerzo desviador y la deformación axial, para diferentes temperaturas. **B)** Relación entre el módulo E a bajas deformaciones y la presión de confinamiento para diferentes temperaturas.



Fuente: Imágenes fueron tomadas del artículo titulado "Analysis of stress strain behavior and constitutive model of artificial methane hydrate" [2].

Según Jocelyn L.H. Grozic et al. [10], de la revisión de artículos científicos, se ha observado que la resistencia del metano hidratado puro es cerca de 20 veces mayor, respecto a la resistencia del hielo a la misma temperatura y presión, incrementándose tal diferencia con la disminución de la temperatura. A primera vista esto podría contradecir lo encontrado por Yanghui Li et al. [3], quienes señalan que una mezcla de hielo e hidrato de metano, presenta menor resistencia a mayor contenido de hidrato, sin embargo la impresión de incoherencia entre los resultados planteados podría ser poco fundamentada, ya que aunque el hidrato puro presente mayor resistencia que el hielo, no significa que la mezcla de hidrato y metano presente una mayor resistencia cuando la fracción de hidrato en la mezcla se incrementa.

5.3 Comportamiento *in situ* de mezclas de hidrato y sedimentos.

Rutqvist et al. [7], señala tres posibles métodos para realizar la explotación del metano contenido en depósitos naturales; estos métodos son la estimulación térmica, el uso de inhibidores y la despresurización del hidrato, considerándose que este último, podría ser el más económico y efectivo. De igual manera el mencionado autor resalta la necesidad de conocer la respuesta mecánica *in situ* de las mezclas de sedimentos e hidratos, para poder dar inicio a la explotación minera del citado recurso energético. Es por esta razón que Jonny Rutqvist et al. [7], realizan el análisis del depósito Mallik

(Mackenzie Delta, Northwest Territories, Canada), y el deposito Mount Elbert (North Slope, Alaska, USA), por ser estos depósitos, unos de los más estudiados por la comunidad científica.

Jonny Rutqvist et al. [7], a partir de información geofísica realizada en campo y el análisis de información reportada en la literatura científica, señalan que el sedimento que compone los mencionados depósitos, tiene un gran componente arenoso, está saturado casi en un 100% por metano hidratado y tiene una porosidad entre 35% y 37%, una cohesión cercana a los 20Mpa para el caso dinámico y 2 Mpa para el caso estático, un ángulo de fricción de aproximadamente 30 grados para el caso estático y dinámico, un módulo de Young de unos 18 GPa para el caso dinámico y 1.8 GPa para el caso dinámico y 0.15 para el caso estático. Como se observa estos valores discrepan de los reportados en ensayos de laboratorio, como se puede ver en las Figuras 2-14 y 2-16, por lo que puede intuirse que la información geofísica solo podría usarse para caracterizar la forma y tamaño de los depósitos de metano hidratado (referencia [15] del Capítulo I), sin que pueda ser incluida de manera confiable en los modelos mecánicos de comportamiento del material.

6. Tendencias generales de comportamiento a usar en la modelación numérica

La información presentada en el numeral 5, entre otros permite que el lector tenga una idea aproximada de las metodologías comunes usadas para construir muestras de arenas e hidratos en laboratorio, y por tanto así puede establecer algunas de las diferencias que existirán entre la muestra física y la muestra numérica, por efecto de la metodología de preparación.

Por otra parte se hace evidente que el estudio de la influencia del hidrato en la respuesta mecánica de las mezclas de arena y este elemento, debe incluir el efecto de la variación en la saturación con hidrato, sin embargo en la presente investigación se estudia una única mezcla de arena e hidrato, por lo que las tendencias de comportamiento generales presentadas para diferentes valores de saturación, no pueden ser verificadas numéricamente, pero serán útiles para quienes pretendan realizar nuevas investigaciones a partir del presente trabajo.

Una de las características más llamativas de los ensayos reportados en el numeral 5 es que las mezclas de arena e hidrato incrementan su rigidez y resistencia con el aumento en la saturación con hidrato, pero las mezclas de hielo e hidrato disminuyen su resistencia cuando la fracción de hidrato en la mezcla es mayor. Por otra parte tanto las mezclas de arena e hidrato, como las mezclas de hielo e hidrato, incrementan su resistencia con el incremento en el esfuerzo de confinamiento en pruebas Triaxial, y presentan una relación lineal entre deformación axial y esfuerzo, para deformaciones menores al 1%.

Frente a la necesidad de incluir tendencias generales de comportamiento en las modelaciones numéricas realizadas en la presente investigación, se procede a incluir de manera indirecta el efecto que la variación en la temperatura tiene sobre el módulo de Young del hidrato, esto sin que se produzca el cambio de fase de este material, para lo cual se realizan simulaciones numéricas con dos valores del Módulo de Young asignado a las partículas de hidrato, suponiendo que dicho modulo asumirá dos valores diferentes que discreparan en un 15%, según lo reportado por Wang Dong et al. [8], o lo reportado por Yanghui Li et al. [2].

7. Bibliografía

[1]. Yun, T. S., J. C. Santamarina, and C. Ruppel (2007), Mechanical properties of sand, silt and clay containing tetrahydrofuran hydrate, J. Geophys. Res., 112, B04106, doi:10.1029/2006JB004484.

[2]. Feng Yu, Yongchen Song, Weiguo Liu, Yanghui Li and Weihaur Lam (2011), Analysis of stress strain behavior and constitutive model of artificial methane hydrate, Journal of Petroleum Science and Engineering 77, 183 – 188. Elsevier.

[3]. Yanghui Li, Yongchen Song, Weiguo Liu and Feng Yu (2012), Experimental research on the mechanical properties of methane hydrate-ice mixtures. Energies 2012, 5, 181-192; doi: 10.3390/en5020181.

[4]. Nabil Sultan and Sebastien Garziglia (2011), Geomechanical constitutive modelling of gas hydratebearing sediments, Proceeding of the 7th International Conference on Gas hydrate, Edinburgh Scotland, United Kingdom, July 17 – 21, 2011.

[5]. Zhang Weidong, Ma Qingtao, Wang Ruihe and Ren Shaoran (2011), An experimental study of shear strength of gas-hydrate-bearing core samples, China University of Petroleum (Beijing) and Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Pet.Sci.(2011)8:177-182, DOI 10.1007/s12182-011-0132-2.

[6]. Jeffrey A. Priest, Emily V. L. Rees, and Christopher R. I. Clayton (2009), Influence of gas hydrate morphology on the seismic velocities of sands, Journal of Geophysical Research, Vol. 114, B11205, doi:10.1029/2009JB006284.

[7]. Jonny Rutqvist, George J. Moridis, Tarun Grover and Timothy Collett (2008), Geomechanical Response of Known Permafrost Hydrate Deposits to Depressurization-Induced Production, Proceedings of the 6th International Conference on Gas Hydrates.

[8]. Wang Dong, LI DongLiang, ZHANG HaiLan, Fan ShuanShi & Zhao HaiBo (2008), Laboratory measurement of longitudinal wave velocity of artificial gas hydrate under different temperatures and pressures, Science in China Series G: Physics Mechanics and Astronomy, vol. 51, no. 12, 1905-1913.

[9] William Winters, Michael Walker, Rober Hunter, Timothy Collett, Ray Boswell, Kelly Rose, William Waite, Marta Torres, Shirish Patil, Abhijit Dandekar (2011). Physical properties of sediments from the mount elbert gas hydrate stratigraphic test well, alaska north slope. Marine and petroleum Geology 28(2011) 361 – 380.

[10]. Jocelyn L.H. Grozic and Hossein Ghiassian (2010), Undrained shear strength of methane hydratebearing sand; preliminary laboratory results, University of Calgary, Calgary, Alberta, Canada, 459 – 466.

[11]. David M. Wood (2004). Soil Behavior and Critical State Soil Mechanics, Cambridge University Press, 496pp. ISBN-10: 0521337828.

[12]. Marco Antonio Amaya Arciniegas (2008). Relación entre propiedades estáticas y dinámicas de una arcilla, Tesis de Maestría en Ingeniería – Geotecnia, Universidad Nacional de Colombia.

[13]. Hyodo, M., Y. Li, J. Yoneda, Y. Nakata, N. Yoshimoto, A. Nishimura, and Y. Song (2013), Mechanical behavior of gas-saturated methane hydrate-bearing sediments, J. Geophys. Res. Solid Earth, 118, 5185–5194, doi:10.1002/2013JB010233.

III. El Método de los Elementos Discretos

En este Capítulo se exponen las bases teóricas del Método de los Elementos Discretos DEM por sus siglas en Ingles, y se presenta el programa de código abierto usado en la investigación, el cual cuenta con todas las rutinas necesarias para adelantar modelaciones numéricas usando el DEM. De igual manera se resumen los resultados de algunas de las investigaciones más relevantes que se han realizado sobre mezclas de arena e hidrato usando el DEM.

1. Método De Los Elementos Discretos

El Método de los Elementos Discretos DEM, es una metodología de cálculo con la que se busca simular el comportamiento de un grupo de partículas bajo algún tipo de excitación, por ejemplo una porción de suelo comprimida en su periferia. Este método numérico requiere la definición geométrica de las partículas, la elaboración de algoritmos para la búsqueda de contactos entre partículas y la inclusión de métodos numéricos para la resolución de las ecuaciones diferenciales que describen el movimiento de cada una de las partículas, y de ser el caso, los esfuerzos y deformaciones experimentados por las mismas.

En la aplicación del Método de los Elementos Discretos DEM, es posible incluir más de un método numérico para la resolución de ecuaciones diferenciales. Por ejemplo en casos donde la capacidad computacional no sea un problema, se podría usar el Método de los Elementos Finitos para modelar, en cada paso de tiempo, los esfuerzos y deformaciones de cada partícula por separado, y Diferencias Finitas para resolver las ecuaciones diferenciales que describan el movimiento de cada partícula.

Figura III-1 Esquema representativo de dos posibles modelos reológicos de contacto entre partículas. En la imagen, k_{η} es la rigidez normal, k_t es la rigidez tangencial, μ es el coeficiente fricción de Coulomb y c_n es el coeficiente de amortiguación viscosa.



En el caso en que las partículas sean consideradas cuerpos indeformables, la definición de las propiedades mecánicas necesarias para simular su interacción, se realiza con base en la definición de un modelo reológico que simula el contacto. Por ejemplo uno o varios modelos reológicos, como los representados en la Figura III-1.

Como se ha observado hasta el momento, en el Método de los Elementos Discretos DEM, se toman como válidas algunas hipótesis con las que se busca simplificar el problema estudiado, logrando de esta manera obviar la influencia de las variables que puedan ser asumidas como poco relevantes, como por ejemplo la deformación de cada partícula [7], la cual en un gran número de aplicaciones puede ser considerada muy pequeña en comparación con la deformación global experimentada por el medio granular como un todo.

Desde las primeras publicaciones del Método de los Elementos Discretos, realizadas por Cundall [7], se menciona que para el caso de materiales granulares como la arena o fragmentos de roca, la deformación global del medio granular se debe en mayor parte al movimiento de las partículas como un cuerpo rígido y no a la deformación individual de cada partícula; situación que puede ser aprovechada para disminuir la necesidad de recursos computacionales de alto nivel. Es así que en el presente trabajo la modelación numérica se lleva a cabo considerando que las partículas son esferas muy rígidas, y que su comportamiento constitutivo puede ser simplificado al considerando solo en el contacto con otras partículas, para lo cual se hace uso de un traslapo hipotético, a través del cual se calculan las fuerzas entre ellas.

Al programar el método de los elementos discretos, se podrán seguir los siguientes pasos generales [3],

- a. Definir la región del espacio donde existirán las partículas.
- Definir geométricamente las partículas y las propiedades mecánicas a usar en las zonas de contacto, según el modelo reológico que se haya escogido para el mismo.
- c. Establecer el lapso de tiempo que dura la simulación y dividir dicho lapso de tiempo en tantos pasos de tiempo como sea necesario.

- d. Ubicar las partículas en el espacio y definir otras condiciones iniciales, como lo es la velocidad de cada partícula.
- e. Establecer un proceso de cálculo cíclico que evolucione con cada paso de tiempo hasta alcanzar el lapso de tiempo total de la simulación.
- f. Para cada paso de tiempo y haciendo uso de la posición de cada partícula, se verifica la existencia de contactos entre las mismas. Es así que en el análisis de la interacción para la partícula *i*, se verifica si esta se encuentra en contacto con alguna otra partícula del medio, y de ser así y haciendo uso del traslapo entre cada par de partículas se calcula el vector fuerza existente entre dicho par de partículas para el mencionado traslapo, esto con base en el modelo reológico que se haya definido. De igual manera se calculan otros vectores fuerza que se generen por el traslapo de la partícula *i*, con otras partículas vecinas en dicho paso de tiempo. Este procedimiento debe continuar en cada paso de tiempo, hasta tanto se haya verificado la totalidad de los contactos para cada una de las partículas del medio.

De esta manera y tomado como ejemplo el caso de un análisis en 3 dimensiones donde no se tome en cuenta la rotación de las partículas, se obtiene una matriz de 3 filas por *s* columnas, donde *s* es el número de partículas del medio, en cuyas columnas se han sumado los vectores fuerza asociados a cada uno de los traslapos de la partícula *i*, con alguna otra partícula vecina. Finalmente en cada paso de tiempo se toma la matriz de fuerzas, y cada elemento de sus columnas se divide por la respectiva masa de la partícula que representan, y de esta manera se obtiene la matriz de aceleraciones; esto sin olvidar adicionar la influencia del campo gravitacional si es que este existe.

g. Con la matriz de aceleraciones obtenida en un paso de tiempo y haciendo uso de la velocidad y posición de cada partícula para dicho paso de tiempo, se calcula la velocidad y posición de cada partícula en el próximo paso de tiempo, y a partir de las nuevas posiciones, se verificara la existencia de traslapos entre partículas y de esta manera la matriz de aceleraciones resultante, proceso que se seguirá hasta alcanzar la totalidad de pasos de tiempo necesarios para completar el lapso de tiempo que durara la simulación, el cual es un parámetro que define el usuario del método numérico según los fines de su investigación.

Es importante mencionar que cada uno de los pasos antes descritos, podrá ser tan exigente como se quiera. Por ejemplo el espacio geométrico donde existirán las partículas, podría ser definido con un cubo del cual no pueden salir las partículas, o un cubo que permite la salida de partículas o, por ejemplo, un espacio irregular con diferentes propiedades como lo es la habilidad para expandirse, comprimirse o cambiar de forma etc.

De igual manera la definición geométrica de las partículas, su inserción en el espacio, y la definición de sus propiedades mecánicas, podría no ser un problema trivial. Por ejemplo se puede considerar el caso en el que las partículas sean elementos geométricamente irregulares y deformables en toda su extensión. Sin embargo un aspecto común a todas las aplicaciones es la búsqueda de partículas en contacto, por lo que a este aspecto es necesario prestarle gran atención, pues de él depende que la modelación de cierto número de partículas demore mayor o menor tiempo.

En la literatura especializada en la modelación de sistemas granulares [3] [4] [5], se han propuesto diferentes algoritmos para optimizar el proceso de búsqueda de contactos. De esta manera cada algoritmo trata de evitar que en cada paso de tiempo se ejecute un proceso de búsqueda que involucre el chequeo de un posible contacto de la partícula *i* con las demás partículas del medio. Por lo que un buen algoritmo para la búsqueda de contactos, debe enfocarse en chequear el posible contacto entre la partícula *i* y solo un pequeño puñado de las partículas vecinas, basándose para ello en el movimiento esperado de las partículas.

Hasta este punto se han expuesto las generalidades del Método de los Elementos Discretos DEM, haciéndose claro que este método no es un método adicional para resolver una ecuación diferencial en un dominio especificado, sino que es una herramienta o metodología que para el caso de sistemas granulares logra eliminar hipótesis como la suposición de que un suelo es un medio continuo, más aun cuando procesos como la dilatancia y la contracción se generan a nivel de grano y su modelación desde el punto de vista de los medios continuos podría ser una tarea muy difícil o tal vez imposible de abordar. A continuación se presentan las ecuaciones con las cuales se pretende modelar el movimiento e interacción de las partículas en el medio granular.

1.1 Ecuaciones de Movimiento

Como fue mencionado en el numeral anterior, en específico en el literal f, en cada paso de tiempo se verifica la existencia de traslapos entre partículas y a partir de los mismos, junto con el modelo reológico definido para simular el contacto, se estima un vector de fuerzas por cada traslapo. Es así que para la partícula i, se tendrán p traslapos, y por tanto p vectores fuerza, los cuales se sumaran vectorialmente para así obtener un único vector fuerza y un único vector torque para dicha partícula. Usualmente al introducir una carga de amortiguamiento básica o mínima en el vector de fuerzas de amortiguamiento, identificado con el superíndice damp en la ecuación (1), se evitan las vibraciones de las partículas sin contacto, disipando su energía. Para la partícula i se tiene [6],

$$m_i \ddot{\boldsymbol{u}}_i = \boldsymbol{F}_i + \boldsymbol{F}_i^{damp} \tag{1}$$

$$I_i \dot{\boldsymbol{\omega}}_i = \boldsymbol{T}_i + \boldsymbol{T}_i^{damp} \tag{2}$$

donde **u** es el vector desplazamiento del centro de masa de la partícula i, **\omega** el vector velocidad angular, m su masa e I su momento de inercia. Los vectores **F** y **T** son las sumas de todas las fuerzas y momentos aplicados al elemento, respectivamente. Para un paso de tiempo n y para la partícula i, se tendrá un vector fuerza, a partir del cual se pude calcular el vector aceleración para la partícula i, como sigue,

$$\ddot{\boldsymbol{u}}_{i}^{n} = \left(\boldsymbol{F}_{i}^{n} + \boldsymbol{F}_{i}^{damp}\right)/m_{i} \tag{3}$$

Para obtener la posición de la partícula i en el siguiente paso de tiempo (n + 1), se puede utilizar un esquema de diferencia central en diferencias finitas, o cualquier otro método numérico. Aunque la utilidad de cada método debe ser validada con base en su error y la forma que tendrá la función fuerza en el contacto [3] [6]. Para el movimiento lineal se tiene,

$$\dot{\boldsymbol{u}}_{i}^{n+1/2} = \dot{\boldsymbol{u}}_{i}^{n-1/2} + \ddot{\boldsymbol{u}}_{i}^{n}\Delta t \tag{4}$$

$$\boldsymbol{u}_i^{n+1} = \boldsymbol{u}_i^n + \dot{\boldsymbol{u}}_i^{n+1/2} \Delta t \tag{5}$$

Al observar las ecuaciones (5) y (6), lo primero que se observa es que la velocidad y la posición no se obtienen para el mismo paso de tiempo, por lo que se hace evidente la necesidad de escoger muy bien el método numérico para la resolución de dichas ecuaciones y fácilmente se concluye que a pesar de que un esquema de diferencia central es útil para resolver las ecuaciones antes presentadas, tal vez no sea la mejor opción. Para el caso del movimiento rotacional se tiene el siguiente vector de aceleración rotacional [6],

$$\dot{\boldsymbol{\omega}}_{i}^{n} = \left(\boldsymbol{T}_{i}^{n} + \boldsymbol{T}_{i}^{damp}\right) / I_{i} \tag{6}$$

Con el vector aceleración obtenido en el paso n, se obtiene la velocidad angular en el paso (n + 1/2),

$$\boldsymbol{\omega}_{i}^{n+1/2} = \boldsymbol{\omega}_{i}^{n-1/2} + \dot{\boldsymbol{\omega}}_{i}^{n} \Delta t \tag{7}$$

Es así que el incremento de rotación $\Delta \theta = \{\Delta \theta_x \Delta \theta_y \Delta \theta_z\}^T$, para el paso (n + 1/2), es,

$$\Delta \boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\omega}_i^{n+1/2} \Delta t \tag{8}$$

Con este vector de incrementos de rotación se actualizan las fuerzas tangenciales. Adicionalmente para establecer la matriz de rotación que relaciona la rotación local de la partícula con el sistema global de referencia, se debe establecer un esquema multiplicativo adecuado [6].

1.2 Evaluación de las fuerzas de contacto

Para el caso de modelaciones donde se supone que las partículas son indeformables y por tanto su interacción se obtiene a través de un vector traslapo hipotético (δ_{ij}) , ubicado en la zona de contacto con las partículas vecinas, es común asumir que la fuerza en dichos contactos será la suma de un componente elástico y un componente plástico o disipativo. Volviendo a la ecuación (1), la componente elástica F_i , podrá ser calculada como sigue,

$$\boldsymbol{F}_{i} = \sum_{1}^{d} \boldsymbol{F}_{ij} = (k_{ij}) (\boldsymbol{\delta}_{ij})$$
(9)

Donde *d* es el número de partículas en contacto con la partícula *i*, F_{ij} es el vector fuerza asociado al vector traslapo δ_{ij} entre la partícula *i* y la partícula *j*, y (k_{ij}) es el factor de proporcionalidad entre fuerza y deformación para el contacto evaluado. En estas ecuaciones el subíndice *ij* representa la fuerza, parámetro, desplazamiento, velocidad, aceleración, o traslapo entre la partícula *i* y la partícula *j*. En el caso de las fuerzas de amortiguamiento en el Método de los Elementos Discretos DEM, usualmente se consideran dos tipos de cargas disipativas. Estas son el amortiguamiento viscoso y el amortiguamiento no-viscoso [3] [6]. En el caso del amortiguamiento viscoso las ecuaciones para su cálculo e inclusión en la ecuación (1), son las siguientes,

$$\boldsymbol{F}_{i}^{damp} = \sum_{1}^{d} \boldsymbol{F}_{ij}^{damp} = -\alpha^{\vartheta t} m_{i} \dot{\boldsymbol{u}}_{ij} \qquad (10) \qquad \boldsymbol{T}_{i}^{damp} = -\alpha^{\vartheta r} I_{i} \boldsymbol{\omega}_{i} \qquad (11)$$

Para el caso del amortiguamiento no viscoso, se tiene,

$$\boldsymbol{F}_{i}^{damp} = \sum_{1}^{d} \boldsymbol{F}_{ij}^{damp} = -\alpha^{n\vartheta t} \|\boldsymbol{F}_{ij}\| \frac{\dot{\boldsymbol{u}}_{ij}}{\|\dot{\boldsymbol{u}}_{ij}\|} \quad (12) \qquad \boldsymbol{T}_{i}^{damp} = -\alpha^{n\vartheta t} \|\boldsymbol{T}_{i}\| \frac{\boldsymbol{\omega}_{i}}{\|\boldsymbol{\omega}_{i}\|} \quad (13)$$

Donde $\alpha^{\vartheta t}, \alpha^{\vartheta r}, \alpha^{n\vartheta t}$ y $\alpha^{n\vartheta r}$ son constantes de amortiguamiento. En cada contacto se debe validar la tercera ley de Newton ($F_1 = -F_2$), y para cada uno de ellos debe descomponerse la fuerza en dirección normal y tangencial al contacto, F_n y F_t , respectivamente,

$$\boldsymbol{F} = \{\boldsymbol{F}_i + \boldsymbol{F}_i^{damp}\} + \boldsymbol{F}_t = F_n \boldsymbol{\eta} + \boldsymbol{F}_t$$
(14)

donde η es el vector unitario que une los centros de las partículas. Como ha sido mencionado, las fuerzas en los contactos F_n y F_t se obtienen utilizando un modelo constitutivo como por ejemplo alguno de los presentados en la Figura 3-1. Por otra parte la fuerza de amortiguamiento en sentido normal al contacto (ver Figura 3-1), usualmente es asumida como de tipo viscoso y se puede expresar de la siguiente forma [6],

$$F_{nd} = c_n v_{r\eta} \tag{15}$$

donde $v_{r\eta}$ es la velocidad relativa normal entre los centros de las partículas

$$v_{r\eta} = (\dot{\boldsymbol{u}}_2 - \dot{\boldsymbol{u}}_1) \cdot \boldsymbol{\eta} \tag{16}$$

El coeficiente de amortiguamiento puede considerarse como una parte del amortiguamiento crítico C_{cr} para el sistema de dos partículas, el cual está dado por la siguiente ecuación [6],

$$C_{cr} = \sqrt{\frac{m_1 m_2 k_\eta}{m_1 + m_2}}$$
(17)

En ausencia de cohesión, la fuerza de contacto tangencial aparece al presentarse oposición friccional al movimiento relativo en el punto de contacto. La velocidad relativa tangencial en el punto de contacto V_{rt} es calculada como sigue [6],

$$\boldsymbol{V}_{rt} = \boldsymbol{V}_r - (\boldsymbol{V}_r \cdot \boldsymbol{\eta})\boldsymbol{\eta} \tag{18}$$

con la velocidad relativa V_r entre las partículas como

$$\boldsymbol{V}_r = (\boldsymbol{\dot{u}}_2 + \boldsymbol{\omega}_2 \times \boldsymbol{r}_{C2}) - (\boldsymbol{\dot{u}}_1 + \boldsymbol{\omega}_1 \times \boldsymbol{r}_{C1})$$
(19)

donde \dot{u}_1 , \dot{u}_2 , ω_1 , ω_2 son las velocidades de traslación y rotación para las dos partículas, mientras que r_{C1} y r_{C2} son los vectores que conectan los centros de cada partícula con el punto de contacto [6].

La relación entre la fuerza de fricción $|F_t|$ y el desplazamiento tangencial relativo u_{rt} está dada por el modelo clásico de Coulomb. Al existir la posibilidad de oscilaciones no-físicas en la fuerza de fricción, en la solución numérica se utiliza un modelo regularizado, mediante la descomposición de la velocidad tangencial relativa en sus

partes reversible e irreversible. Este proceso es equivalente a formular el contacto friccional como un problema análogo al de elasto-plasticidad, lo que permite calcular la fuerza de fricción utilizando un algoritmo de retorno radial estándar [6]. En primer lugar, se calcula un estado de prueba de la forma,

$$\boldsymbol{F}_{t}^{trial} = \boldsymbol{F}_{t}^{old} - k_{t} \boldsymbol{V}_{rt} \Delta t \tag{20}$$

y se comprueba la condición de deslizamiento

$$\boldsymbol{\emptyset}^{trial} = \left\| \boldsymbol{F}_{t}^{trial} \right\| - \mu \| F_{n} \| \tag{21}$$

Si el valor de la condición de deslizamiento es menor o igual a cero $(\phi^{trial} \leq 0)$ la fuerza de fricción es la del estado de prueba $(F_t = F_t^{trial})$, mientras que si es positiva la fuerza friccional queda expresada por [6],

$$\boldsymbol{F}_{t} = \mu |F_{n}| \frac{F_{t}^{trial}}{\|F_{t}^{trial}\|}$$
(22)

1.3 Modelo Constitutivo Micro-Mecánico con Cohesión

En las modelación realizadas para obtener los resultados presentados en el Capítulo IV no se incluye la cohesión, ya que se supone que a grandes deformaciones y desplazamientos dicho parámetro puede ser considerado como poco relevante en la respuesta mecánica del material. Para la inclusión de cohesión en el Método de los Elementos Discretos (DEM), usualmente se usa un modelo de contacto frágil perfectamente elástico. Por eso el contacto presentara un comportamiento elástico lineal hasta tanto se supere el límite de fluencia del material cementante o se presente la falla en la zona de transición entre la partícula y el cementante. La fuerza de contacto entre dos partículas con cohesión, en sus direcciones normal y tangencial, se calcula con las siguientes relaciones constitutivas en el rango lineal [6],

$$\sigma = k_n u_n \quad (23) \qquad \qquad \lambda = k_t u_t \tag{24}$$

donde σ es la fuerza de contacto normal, λ es la fuerza de contacto tangencial, k_n es la rigidez en la dirección normal y k_t es la rigidez en la dirección tangencial, u_n es el

desplazamiento relativo normal y u_t es el desplazamiento relativo tangencial. El criterio de falla es [6],

$$\sigma \le R_n \quad (25) \qquad \qquad |\lambda| \le R_t \tag{26}$$

donde R_n y R_t representan el límite de fluencia cohesivo en las direcciones normal y tangencial, respectivamente. En la Figura III-2, se presenta de manera esquemática la ley de contacto para las direcciones normal y tangencial para el modelo frágil perfectamente elástico [6].

Figura III-2: Representación esquemática de la Ley de contacto para el modelo frágil perfectamente elástico. (a) Relación esfuerzo vs desplazamiento relativo normal (b) Relación esfuerzo vs desplazamiento relativo tangencial



Fuente: E. Oñate et al. [6].

2. Software utilizado

LIGGGHTS es el nombre del software de código abierto utilizado en la modelación de la respuesta mecánica de las mezclas de arena e hidrato aquí estudiadas. El programa es una versión modificada de LAMMPS; programa desarrollado por el Laboratorio Nacional de Sandia. LIGGGHTS cuenta con múltiples rutinas que permiten crear partículas en un espacio, utilizar diferentes esquemas numéricos para la solución de ecuaciones de movimiento, incluir condicionantes en la definición del problema, superponer múltiples modelos constitutivos de contacto, incluir elementos tipo pared y demás. Así mismo sus resultados son fácilmente exportables a Paraview para su visualización. Para estimar la fuerza entre un par de partículas se usa un modelo constitutivo dependiente del traslapo entre ellas, la velocidad relativa en dirección normal y la velocidad relativa en dirección tangente al contacto. Cuando la distancia r entre los centros de dos partículas es inferior a la suma de sus radios R_i y R_j , se presenta traslapo entre el par de partículas y por tanto existe fuerza entre las mismas, la cual será proporcional a la magnitud del traslapo y estará definida por la ecuación (27) [12]. Por otra parte en el desarrollo de la investigación solo se tiene en cuenta la parte repulsiva debida al traslapo de las partículas, y la componente elástica se estima con base en la teoría de Hertz [15].

$$\boldsymbol{F} = \left(K_n \boldsymbol{\delta} n_{ij} - \gamma_n \boldsymbol{V} n_{ij}\right) + \left(K_t \boldsymbol{\delta} t_{ij} - \gamma_t \boldsymbol{V} t_{ij}\right)$$
(27)

En esta ecuación el primer término representa la fuerza normal y el segundo término la fuerza tangencial, adicionalmente δn_{ij} es el traslapo en dirección normal al contacto, Vn_{ij} es la velocidad relativa normal al contacto, δt_{ij} es el traslapo en dirección tangente al contacto y Vt_{ij} es la velocidad relativa en dirección tangente al contacto. Por otra parte el traslapo en dirección tangente al contacto para satisfacer la siguiente ecuación,

$$\boldsymbol{F}_t \le X_{\mu} \boldsymbol{F}_n \tag{28}$$

En cuanto a los demás coeficientes, K_n es la rigidez elástica en la dirección normal al contacto, K_t es la rigidez elástica en la dirección tangente al contacto, γ_n y γ_t son los coeficientes de amortiguación visco-elástica en dirección normal y tangencial respectivamente [12]. Por su parte X_{μ} es el coeficiente de fricción entre partículas. Para una explicación detallada del modelo de contacto asociado al traslapo entre partículas se recomienda revisar las referencias [13], [14] y [15]. Por otra parte los parámetros a nivel de partícula se calculan como sigue [12],

$$k_n = \frac{4}{3} E^* \sqrt{R^* \delta_n} \tag{29}$$

$$\gamma_n = -2\sqrt{\frac{5}{6}}\beta^*\sqrt{S_n m^*} \ge 0 \tag{30}$$

$$k_t = 8G^* \sqrt{R^* \delta_n} \tag{31}$$

$$\gamma_t = -2\sqrt{\frac{5}{6}}\beta^* \sqrt{S_t m^*} \ge 0 \tag{32}$$

$$S_n = 2E^* \sqrt{R^* \delta_n} \tag{33}$$

$$S_t = 8G^* \sqrt{R^* \delta_n} \tag{34}$$

$$\beta^* = \frac{\ln(\beta)}{\sqrt{\ln^2(\beta) + \pi^2}} \tag{35}$$

$$\frac{1}{E^*} = \frac{(1-\nu_1^2)}{E_1} + \frac{(1-\nu_2^2)}{E_2}$$
(36)

$$\frac{1}{G^*} = \frac{2(2-\nu_1)(1+\nu_1)}{E_1} + \frac{2(2-\nu_2)(1+\nu_2)}{E_2}$$
(37)

$$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \tag{38}$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \tag{39}$$

En cuanto a la energía de cohesión [16], dicho parámetro no se toma en cuenta en el presente trabajo, ya que se estudia el comportamiento del material a grandes deformaciones donde todo efecto de la cohesión en el comportamiento del material se pierde, por lo que no se justifica asignar recurso computacional a la inclusión de dicha variable.

3. Aplicación del DEM en el estudio de mezclas de hidrato y arena

Haciendo uso del Método de los Elementos Discretos y con la ayuda de un software especializado (Particle flow code by Itasca), J. Brugada et al. [1] y Yanxin Yu [9],

realizan el análisis numérico del comportamiento esfuerzo deformación de mezclas de arena e hidrato bajo pruebas Triaxial, obteniendo un muy buen ajuste entre los resultados de dichas modelaciones y los resultados experimentales reportados por Masui et al. Para esto utilizan una muestra cilíndrica de 1.75 mm de diámetro y 3.5mm de altura, compuesta por partículas de arena esféricas con diámetro comprendido entre 0.1 mm y 0.25 mm, y partículas de hidrato esféricas de 0.04 mm de diámetro.

En el procedimiento seguido por J. Brugada et al. [1] y Yanxin Yu et al [9], las muestras fueron consolidadas isotrópicamente a 1 Mpa, bajo dos modalidades (solo en el caso de J. Brugada et al. [1], pues Yanxin Yu et al. utilizó la segunda modalidad), que no influyeron de manera significativa en los resultados obtenidos. La primera modalidad fue el consolidar isotrópicamente la arena y una vez alcanzado el equilibrio, incluir en los vacíos las partículas de hidrato hasta alcanzar la saturación deseada. La segunda modalidad fue el generar una mezcla inicial de arena e hidrato y consolidar esta mezcla bajo un esfuerzo isotrópico de 1 Mpa. La relación entre la rigidez del contacto hidrato-arena se estableció en 0.1, la velocidad de corte fue 1x10⁻¹⁰ m/s y el esfuerzo de consolidación, fue conservado como presión de cámara durante el proceso de corte. Por otra parte los parámetros utilizados por J. Brugada et al. [1] y Yanxin Yu et al [9], son los presentados en la Figura III-3. En cuanto a la membrana los mencionados autores utilizan una rigidez normal de 1x10⁴ N/m, una rigidez tangencial igual a cero y una relación de poisson igual a cero.

Property	Soil	Methane hydrate
Density (kg/m ³)	2,300	900
Particle sizes, D (mm)	0.1-0.25	0.04
Contact stifness E_c (MPa)	286	0.286-28.6
Normal stiffness k_n (N/m)	$2DE_c$	$2DE_c$
Shear stiffness k_s (N/m)	$0.7 k_n$	$0.7 k_n$
Inter-particle friction μ	0.75	0.75

Figura III-3: Parámetros mecánicos usados por J. Brugada et al. [1],

Fuente: J. Brugada [1].

Otro aspecto a resaltar del artículo de Yanxin Yu et al [9], es que en el mismo se publica la cantidad de partículas de hidrato y arena usadas en la modelación. Es así que los mencionados autores usan 1956 partículas de arena y 10114 partículas de hidrato para representar una saturación del 10% con hidrato, y 50570 partículas de

hidrato, junto con 1956 partículas de arena para representar una saturación del 50% con hidrato, lo cual para el último caso indica que el volumen global de la muestra es 250000 veces mayor al volumen de una partícula de hidrato.

Como conclusiones del estudio adelantado por J. Brugada et al. [1], se comprueba numéricamente lo observado en pruebas de laboratorio, donde para saturaciones con hidrato mayores al 20%, se comienza a presentar contribución del hidrato en la resistencia global de la muestra. Así mismo las simulaciones adelantadas por J. Brugada et al. [1], muestran que la presencia de hidrato en la muestra, influye en la deformación volumétrica que esta experimenta. Adicionalmente los mencionados autores reportan que la relación de rigideces del contacto arena-hidrato (E_{chyd}/E_{csoil}), *tiene un importante efecto en la curva esfuerzo deformación y el comportamiento volumétrico, encontrándose que dicha contribución se hace representativa cuando la mencionada relación alcanza valores de 0.1*. Sin embargo J. Brugada et al. [1], resaltan <u>la necesidad de profundizar en el estudio de la influencia de la relación de rigideces del contacto arena incertidumbre en la rigidez del contacto del hidrato (E_{chyd}/E_{csoil}), pues existe cierta incertidumbre en <u>la rigidez del contacto del hidrato</u> (E_{chyd}).</u>

Una de las variaciones del artículo Yanxin Yu et al [9], respecto al artículo de J. Brugada *et al.* [1], es que el primero considera dos escenarios para la formación de los hidratos. En el primer escenario se asume que el hidrato se forma en los poros del sedimento sin servir de elemento cohesivo o elemento de unión entre las partículas de hidrato (esto hasta saturaciones con hidrato inferiores al 80%), y en el segundo escenario se considera que el hidrato, sirve de elemento cohesivo o elemento de unión entre granos de sedimento desde su formación o nucleación.

A partir de los dos escenarios descritos en el párrafo anterior, Yanxin Yu et al [9], realiza modelaciones de ensayos de trasmisión de ondas de corte (simulación del ensayo de Bender Element), encontrando que la velocidad de las mismas se incrementa cuando el hidrato sirve de cementante entre los granos de sedimento, lo cual es de esperarse pues como cualquier cementante, al unirse las partículas con una unión cohesiva se incrementa la rigidez global del medio a pequeñas deformaciones. Sin embargo los resultados del artículo no son los puntos a resaltar, sino la suposición de que los hidratos se formaran en los poros hasta saturaciones de casi el 80%, sin generar uniones cohesivas entre los granos de sedimentos, lo cual resulta un poco

difícil de asimilar más aún si tomamos en cuenta lo expuesto por Jong-Won Jung (Referencia [13] del Capítulo I), quien manifiesta que en razón al cambio en la energía libre de Gibbs, el hidrato se formará preferencialmente sobre la superficie de los granos del sedimento.

Se recuerda que Stephan A. Klapp (Referencia [14] del Capítulo I), señala que el aumento en el nivel de saturación con hidratos se da frecuentemente por engrosamiento de los granos o cúmulos de hidrato, por lo que una nucleación del hidrato sobre el grano del sedimento, que posteriormente crece al interior del poro hasta alcanzar saturaciones globales en la muestra de suelo cercanas al 80%, sin generar en el proceso uniones cohesivas entre los granos de sedimento, podría resultar difícil de ver en la naturaleza (ver Referencia [4] del Capítulo IV).

Otra investigación del comportamiento mecánico de mezclas de sedimentos e hidratos a nivel de grano, es desarrollada por Jung J.-W et al. [2] (Ver referencia [1]), (utilizando el software Particle flow code by Itasca). Estos investigadores realizan una modelación similar a la desarrollada por J. Brugada et al. [1], utilizando los parámetros presentados a continuación en la Figura III-4.

Parameter	Value	
Soil Partic	eles	
Soil particle density (kg/m ³)	2650	
Initial porosity (before consolidation)	0.402 and 0.532	
Particle radii range (m)	0.62×10^{-3} -to- 0.82×10^{-3}	
Interparticle friction coefficient	0.5	
Normal contact stiffness (N/m)	1×10^7	
Shear contact stiffness (N/m)	$1 imes 10^7$	
Distributed H	lydrate	
Hydrate particle density (kg/m ³)	2650	
Hydrate particle radius (m)	0.22×10^{-3}	
Assumed bond radius (m)	0.22×10^{-3}	
Normal contact stiffness (N/m)	1.54×10^{8}	
Shear contact stiffness (N/m)	1.54×10^{8}	
Hydrate-mineral normal bonding strength (N/m ²)	2×10^{5}	
Hydrate-mineral shear bonding strength (N/m ²)	2×10^5	
e: Jung JW. et al. [2].		

Figura III-4: Parámetros mecánicos usados por Jung, J.-W et al. [2]

Jung J.-W et al. [2], obtienen un muy buen ajuste entre los resultados de las modelaciones numéricas con elementos discretos y los resultados experimentales reportados por la comunidad científica para muestras similares. De los resultados reportados por Jung, J.-W et al. [2], nuevamente se observa que el incremento en la saturación con hidratos, trae consigo un incremento en la rigidez, la resistencia pico y la tendencia dilatante de la muestra, razón por la cual la línea del estado crítico se mueve a relaciones de vacíos mayores y mayores resistencias, lo cual permite ver que usando el DEM es posible obtener las tendencias de comportamiento generales reportadas en el numeral 5 del Capítulo II. Así mismo Jung J.-W et al. [2], indican que aunque el incremento en la saturación con hidrato de la muestra, trae consigo un incremento en la cohesión aparente de la misma, <u>el ángulo de fricción representativo de la línea el estado crítico, no presenta mayor variación cuando el hidrato se distribuye de manera uniforme en la muestra.</u>

Otra investigación a resaltar se titula "Discrete Element Simulation of Crushable Soil" y fue publicada por Cheng, Y. P et al. [8], y aunque en este artículo no se estudia el comportamiento de mezclas de arena e hidrato, es importante ya que en el mismo se presentan resultados de la respuesta mecánica de aglomerados de arena con presencia de cementante entre partículas a través de modelaciones con el DEM, lo cual en cierta medida podría conservar similitud con las mezclas de arena e hidrato.

Cheng, Y. P et al. [8], presentan gráficas donde se observa que en los procesos de consolidación y falla de la muestra, <u>se pueden imponer velocidades de carga sobre la muestra de hasta 1m/s, sin tener variaciones significativas en la respuesta esfuerzo deformación</u>, lo cual resulta ser bastante beneficioso ya que en este tipo de modelaciones es muy importante reducir el tiempo de modelación, sin afectar los resultados de las pruebas. Por otra parte los mencionados autores manifiestan que cuando las paredes que comprimirán la muestra, no han hecho contacto con el medio granular, es recomendable no imponer velocidades de compresión mayores a 0.01 m/s, esto con el propósito de evitar rebotes bruscos de las partículas al momento de su contacto inicial con las mencionadas paredes.

Cheng, Y. P et al. [8], adicionalmente resaltan la fuerte dependencia existente entre la densidad relativa y el nivel de esfuerzos, respecto a la resistencia de la muestra. Así mismo presentan graficas donde es posible observar cómo se produce el incremento

en el número de contactos cohesivos rotos, con el incremento en la deformación y esfuerzo desviador, logrando de esta manera identificar algunos rasgos característicos como la ubicación de la resistencia pico a aproximadamente el 2.5% de la deformación desviadora, donde adicionalmente tiene inicio un proceso de rotura continua de contactos cohesivos.

Otro punto importante documentado por Cheng, Y. P et al. [8], es el relacionado con la estimación de las trayectorias de esfuerzos efectivos, por lo que si se supusiera que las muestras tienen agua en sus poros, dichas trayectorias de esfuerzos efectivos se podrían obtener de manera aproximada asumiendo un incremento en la presión de poros proporcional a (δ_u/δ_q) , sin embargo dicha hipótesis podría no ser válida para el caso de las mezclas de arena e hidrato, donde no se puede suponer que el metano en su estado gaseoso es incompresible en el rango de esfuerzos de trabajo.

Figura III-5: Esquema del ensayo físico propuesto por Mingjing Jiang et al [10], y curvas obtenidas por los mencionados autores.



Fuente: Mingjing Jiang et al. [10].

En los artículos hasta aquí citados, el comportamiento mecánico de las mezclas de sedimento e hidrato se ha estudiado mediante el uso del Método de los Elementos Discretos y simulaciones tridimensionales de pruebas Triaxial, sin embargo existen aproximaciones en dos dimensiones que vale la pena mencionar. Este es el caso de

Mingjing Jiang et al [10], quienes realizan modelaciones de pruebas biaxiales y plantean un ensayo físico con el que logran establecer un modelo de contacto bastante consistente con el comportamiento esperado para el material analizado, y que incluye tres grados de libertad, el desplazamiento normal al contacto, el desplazamiento tangencial y la rotación. Aunque en este artículo se usan dos cementantes diferentes al hidrato, cemento y algún tipo de epoxico, las curvas que relacionan las cargas medidas con la deformación o el desplazamiento son calibradas con resultados de pruebas realizadas a hidratos a nivel macro obteniéndose patrones de falla congruentes con los observados en materiales rígidos y que pudieren esperase para las mezclas de arenas e hidratos.

La calidad de los resultados se presume bastante buena ya que en el artículo de Mingjing Jiang et al [10], no solo se mejora el modelo de contacto que definirá la respuesta global del material, mejora en la definición del modelo reológico y los parámetros mecánicos que lo alimentan, sino que se reproducen bandas de corte que como fue mencionado anteriormente, son esperadas en materiales frágiles como las mezclas de hidrato y sedimentos.

4. Trabajos recientes

El estado del arte en lo referente a la modelación numérica de mezclas de sedimentos e hidrato haciendo uso del Método de los Elementos Discretos (DEM), está representado por los trabajos publicados por Mingjing Jiang J. C. Santamarina, y K. Soga. Por ejemplo, Mingjing Jian ha trabajado en la definición de los modelos de contacto para mezclas de hidrato y arena, y en uno de sus artículos recientes [11], trata de modelar el efecto de la contrapresión en pruebas bidimensionales a través de la manipulación a voluntad de los parámetros usados en el modelo de contacto cohesivo, con el cual se pretende representar el hidrato como elemento cementante entre pares de partículas.

Es así que Mingjing Jiang [11], señala bibliografía donde se indica que la contrapresión en pruebas Triaxial de laboratorio, tiene un efecto significativo en la respuesta esfuerzo deformación de las mezclas de hidrato y arena, logrando representar dicha observación con los resultados de modelaciones numéricas usando el DEM (principalmente manipulando los parámetros del modelo cohesivo de contacto). De esta manera, Mingjing Jiang [11], indican que la resistencia de la mezcla de sedimentos e hidrato, se incrementa con el aumento en la contrapresión, sin embargo tales resultados deben ser vistos con cautela para su interpretación, ya que como lo menciona Nabil Sultan et al (ver referencia [4] del Capítulo II), a partir del 25% de saturación con hidrato, el principio de los esfuerzos efectivos aplicable a medios granulares (y entendido según la mecánica de suelos tradicional), empieza a perder aplicabilidad, ya que el hidrato inicia a cementar los granos de sedimento y disminuye la permeabilidad del medio evitando que la mencionada contrapresión se distribuya de manera uniforme en la muestra. Es decir se genera un seudo-cambio de escala para el análisis de la presión de poros, donde la contrapresión no puede ser vista como el esfuerzo promedio para el fluido existente en una muestra de miles de partículas, sino que tiene que verse como un esfuerzo en un fluido ubicado entre algunos fragmentos de muestra que son afectados por el principio de Arquímedes, la dinámica de partículas y la dinámica de fluidos. Por otra parte la forma de preparación de las muestras en laboratorio, puede generar mayor acumulación de hidrato en las zonas cercanas a los pedestales y evitar que la mencionada contrapresión se distribuya de manera homogénea en la muestra, por lo que el esfuerzo efectivo al interior de la muestra podría ser mayor al esperado y de ahí los mayores valores de resistencia reportados.

5. Bibliografía

[1]. J. Brugada, Y. P. Cheng, K. Soga and J. C. Santamarina (2010), Discrete element modelling of geomechanical behavior of methane hydrate soils with pore-filling hydrate distribution, (Springer-Verlag), Granular Matter 517–525, doi 10.1007/s10035-010-0210-y.

[2]. Jung J.-W., J. C. Santamarina, and K. Soga (2012), Stress-strain response of hydrate-bearing sands: Numerical study using discrete element method simulations, J. Geophys. Res., 117, B04202, doi:10.1029/2011JB009040.

[3]. Hans-Georg Matuttis and Jian Chen (2014), Understanding the Discrete Element Method, Simulation of Non-Spherical Particles for Granular and Multi-body Systems, John Wiley and Sons, Singapore Pte, Ltd. ISBN: 978-1-118-56720-3.

[4]. Munjiza Antonio (2004), The Combine Finite-Discrete Element Method, John Wiley and Sons, Ltd. ISBN: 978-0-470-84199-0.

[5]. Munjiza Antonio, Knight Earl and Rougier Esteban (2012), Computational Mechanics of Discontinua, John Wiley and Sons, Ltd. ISBN: 978-0-470-97080-5. [6] E. Oñate, C. Labra, F. Zárate, J. Rojek and J. Miquel. (2005), Avances en el Desarrollo de los Métodos de Elementos Discretos y de Elementos Finitos para el Análisis de Problemas de Fractura, Anales de Mecánica de La Fractura Vol. 22 (2005).

[7] Cundall P.A and Strack O.D.L (1979), A Discrete Numerical Model for Granular Assemblies, Geotechnique 29, No.1, 47 - 65.

[8]. Cheng, Y. P., Nakata, Y. and Bolton, M. D. (2003), Discrete Element Simulation of Crushable Soil, Geotechnique 53, No. 7, 633–641.

[9]. Yanxin Yu, Xiaomin Xu, Yi Pik Cheng and Kenichi Soga (2013), Study on Small-strain Behaviours of Methane Hydrate Sandy Sediments Using Discrete Element Method, Powders and Grains, AIP Conf. Proc. 1542, 555-558 (2013); doi: 10.1063/1.4811991.

[10]. Mingjing Jiang, He Chen, Mauricio Tapias, Marcos Arroyo and Rui Fang (2014), Study of mechanical behavior and strain localization of methane hydrate bearing sediments with different saturations by a new DEM model, Elsevier, Computers and Geotechnics 57, Pag 122–138, doi: 10.1016/j.compgeo.2014.01.012.

[11]. Mingjing Jiang, Fangyuan Zhu and Stefano Utili (2015), Investigation into the effect of backpressure on the mechanical behavior of methane-hydrate-bearing sediments via DEM analyses, Elsevier, Computers and Geotechnics 69, Pag 551–563, doi: 10.1016/j.compgeo.2015.06.019.

[12]. Christoph Kloss (2015), LIGGGHTS(R)-PUBLIC DEM - User Manual, DCS Computing Gmbh, Linz, Austria.

[13]. Thomas Schwager and Thorsten Pöschel (2007), Coefficient of restitution and linear-dashpot model revisited, Granular Matter 9: Pag 465–469, doi 10.1007/s10035-007-0065-z.

[14]. Alberto Di Renzo and Francesco Paolo Di Maio (2004), Comparison of contact-force models for the simulation of collisions in DEM-based granular flow codes, Chemical Engineering Science 59, Pag 525 – 541, doi:10.1016/j.ces.2003.09.037.

[15]. Nikolai V. Brilliantov, Frank Spahn and Jan-Martin Hertzsch (1996), Model for collisions in granular gases, The American Physical Society, Physical Review E, Volume 53, Number 5, Pag 82 – 92.

[16]. K. L. Johnsont, K. Kendall and A. D. Roberts (1971), Surface energy and the contact of elastic solids, Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Vol. 324, No. 1558, Pag. 301-313.

IV. Modelación y resultados

El marco teórico presentado en los Capítulos I, II y III, es usado en el presente capítulo para fundamentar las simulaciones numéricas de los ensayos de Corte Directo y los ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, a partir de los cuales se calcula la superficie de fluencia de la mezcla de arena e hidrato bajo la suposición de valides del modelo CamClay. En primer lugar y como punto de partida se toman las variables y valores usados por otros autores en modelaciones con el DEM, y se procede a establecer el procedimiento de formación de la muestra a simular; esto de acuerdo con lo presentado en el Capítulo III.

La sensibilidad del modelo frente al cambio en el valor numérico de las variables con las cuales se representa el contacto en el Método de los Elementos Discretos (DEM), es estudiada mediante la ejecución de múltiples ensayos. Por otra parte una vez realizadas las modelaciones numéricas para establecer el efecto que tiene la variación de cada parámetro en el modelo de contacto, se procede a calibrar la arena, para posteriormente realizar los ensayos de Corte Directo y Compresión Unidimensional sobre la mezcla de arena e hidrato, para varias Relaciones de Módulos y Coeficientes de Fricción, siguiendo las recomendaciones de varios de los autores citados en los Capítulos II y III. Finalmente se presentan los resultados obtenidos y su análisis, que dan origen a las conclusiones y recomendaciones que presentan en el capítulo V.

1. Características mecánicas de las partículas

El primer paso para poder realizar las simulaciones de los ensayos de Corte Directo y los ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, es definir el valor de las variables o parámetros de contacto a usar en el DEM según el modelo de contacto seleccionado en el numeral 2 del Capítulo III. Esto se logra haciendo uso de los parámetros mecánicos reportados por las referencias [1], [2], [9] y [10], en el Capítulo III, los cuales se presentan a continuación en la Tabla IV-1.

PARÁMETRO	VALOR	
Densidad de la partícula de arena (kg/m ³)	2650	
Coeficiente de fricción entre partículas de arena	0.75	

Tabla IV-1: Parámetros mecánicos iniciales en la investigación.

Densidad de la partícula de hidrato (kg/m ³)	900
Modulo Elástico E _c para las partículas de arena (MPa)	286
Modulo Elástico E_c para las partículas de hidrato (MPa)	28.6
Coeficiente de fricción entre partículas de hidrato	0.75
Relación de Poisson para el hidrato	0.32

La información fue tomada de las referencias [1], [2], [9] y [10] del Capítulo III. Por otra parte se asume una relación de Poisson de 0.5 para la arena.

2. Definición de los ensayos numéricos

La geometría global del medio granular que se simula en el presente capítulo, concuerda con la de un prisma cuadrangular cuya base tiene 16 mm x 16 mm, y cuya altura es 12.1 mm, dicha geometría global se puede apreciar en Figura IV-1. Uno de los rasgos que pudiere generar mayor inquietud en el lector, es la división de cada lado de la caja que contendrá las partículas de arena e hidrato, en pequeñas piezas. En este respecto se aclara que el propósito de la división de las paredes en pequeños triángulos solo tiene un propósito estético en la etapa de formación de la muestra, pero adquiere un propósito practico en la etapa de carga, ya que a través de dicha subdivisión se busca que en promedio para cada triangulo exista una partícula de arena en contacto.

Figura IV-1: Dominio global del medio granular a ser modelado (no se muestran las partículas).



Fuente: Elaboración propia.

Al igual que en el artículo publicado por Jung, J.-W., J. C. Santamarina, and K. Soga [2] (referencia del Capítulo III), las partículas son esferas rígidas cuya interacción se simula admitiendo la existencia de un traslapo entre las mismas, sin embargo para la elaboración numérica de la muestra se sigue un procedimiento diferente al desarrollado por los autores mencionados; este procedimiento de elaboración de la muestra se explica en el numeral 2.1.

Debido a restricciones del software utilizado, no es posible asignar una membrana deformable en la frontera de la muestra, y por tanto no es posible simular ensayos Triaxiales que permitan obtener las curvas esfuerzo deformación necesarias para obtener la superficie de fluencia de manera directa, por lo que dicha superficie es impuesta a la mezcla de arena e hidrato, con base en el modelo CamClay cuyas bases teóricas se presentan en el Capítulo II. Para obtener los parámetros necesarios para calcular la superficie de fluencia bajo la suposición de valides del modelo CamClay, se hace uso de modelaciones numéricas de pruebas de Compresión Unidimensional con deformación radial nula y ensayos de Corte Directo, estos últimos similares al ejemplo del bloque friccional presentado en el Capítulo II.

Laura A. Stern et al [4], publican un artículo con imágenes de mezclas de sedimento e hidrato de metano obtenidas con Microscopio de Barrido Electrónico (SME), las cuales se pueden ver en la Figura IV-2. En este artículo se enumeran algunas de las principales razones por las cuales las muestras obtenidas en la naturaleza se ven alteradas desde el momento de su extracción, hasta el momento de su análisis en laboratorio, así mismo dicho artículo estudia la presencia de poros en el hidrato y su posible causa, sin embargo para el desarrollo del presente Capítulo, el aspecto de mayor relevancia en la publicación citada, son las imágenes presentadas, donde se observa que las partículas de arena pueden ser idealizadas como esferas que no presentan mayor variación en tamaño, y que pueden suponerse uniformemente distribuidas en el espacio.

Otro de los aspectos que resalta a primera vista en la Figura IV-2, es el tamaño promedio de las partículas de arena, que según la escala visible en la imagen, sería similar al de una esfera de 0.15 mm de radio, sin embargo y como fue expuesto en Capítulo I, existen investigaciones donde el tamaño promedio de los granos de sedimento es ubicado entre las micras y los milímetros, ver las referencias [11] [12] del Capítulo I.

Figura IV-2: Imágenes tomadas con Microscopio de Barrido Electrónico a muestras de sedimentos y metano hidratado. A) Imagen de una muestra de arena e hidrato construida en laboratorio. C) Imagen de una muestra de arena e hidrato obtenida de Mallik Well 5L-38, pozo de exploración ubicado en Beaufort Sea, Canadá. Las imágenes han sido tomadas del artículo Gas hydrate characterization and grain-scale imaging of recovered cores from the Mount Elbert Gas Hydrate Stratigraphic Test Well.



Fuente: Laura A. Stern et al. [4].

J.C. Santamarina et al. [1], publican resultados de pruebas de Corte Directo en arenas con hidrato que son usados en esta investigación para calibrar el modelo numérico. Estas muestras provienen de la Fosa de Nankai en el mar de Japón (Nankai Trough) y según Dai, S et al (Referencia [15] del Capítulo I), los sedimentos presentes en dicho sector en su mayoría son arenas de grano fino a medio, con diámetro que oscila entre los 0.06 mm y los 0.6 mm, por lo que aquí se usarán esferas con radio entre 0.24 mm y 0.33 mm para representar la arena, y esferas con radio de 0.084 mm, para representar el hidrato. La relación de tamaños entre partículas de arena e hidrato se ha tomado de las referencias [1] y [2] del Capítulo III. Adicionalmente el tamaño seleccionado para las partículas de arena e hidrato, ofrece una buena relación entre la calidad de los datos obtenidos y las capacidades de los equipos de cómputo utilizados.

2.1 Preparación de la muestra

En el caso de las investigaciones citadas en el Capítulo III (referencias [1] y [2] del Capítulo III), la muestra de suelo es conformada insertando partículas de manera aleatoria en un espacio dado, para luego incrementar su tamaño hasta lograr llenar el mencionado espacio, sin embargo en el presente trabajo se sigue un procedimiento diferente, pues las partículas son vertidas en el molde bajo la acción de la gravedad.

En este punto es oportuno señalar que investigadores como J. Brugada (referencia [1] del Capítulo III), basados en modelaciones usando el DEM, han encontrado que utilizar cualquiera de los métodos expuestos en el párrafo inmediatamente anterior, no influye significativamente en los resultados obtenidos. Es así que para conformar las muestras, las partículas de arena y metano hidratado son vertidas haciendo uso de un molde de inserción, Molde 2, ubicado sobre el prisma cuadrangular, Molde 1, que define la geometría externa de la muestra, lo cual se visualiza en la Figura IV-3.

Las partículas de arena y metano hidratado son creadas en un volumen de inserción, ubicado al interior del Molde 2 (Zona cuadrangular de 50 mm x 50 mm x 6 mm). Este volumen de inserción es un prisma cuadrangular de 48 mm x 48 mm de base por 4 mm de altura, que conserva una separación mínima de 1 mm con las paredes internas del Molde 2.

En el volumen de inserción se crean 4000 partículas cada 125.000 pasos de tiempo (paso de tiempo de 1 x 10^{-7} segundos), que caen bajo la acción de la gravedad hacia el interior del Molde 1. Por otra parte al momento de la inserción, tanto las partículas de arena, como las paredes de los moldes y las partículas de metano tendrán el mismo módulo de Young, un coeficiente de fricción nulo, una relación de poisson de 0.5 y un coeficiente de restitución de 0.2.

Figura IV-2: Moldes para construir la muestra. En color azul con malla gris se observa el Molde 1 que contendrá la muestra final, y en color verde con malla azul se observa el Molde 2 usado para facilitar la inserción de partículas en el Molde 1.



Fuente: Elaboración propia.

Figura IV-3: Paso 250.000 de la modelación numérica. Se han creado e insertado 12000 partículas de arena e hidrato. El Paso 250.000 equivale a 0.025 segundos





Figura IV-4: Paso 7'000.000 de la modelación numérica. En este punto de la modelación se han insertado 220.000 partículas de arena e hidrato al inicio de la modelación. El Paso 7'000.000 equivale a 0.7 segundos





Figura IV-5: Paso 10'500.000 de la modelación numérica. El paso 10'500.000 equivale a 1.05 segundos





Una vez terminada la etapa de inserción de partículas, se permite que las últimas partículas insertadas caigan en la pila. Cuando la energía cinética lineal y la energía cinética rotacional del grupo alcanzan valores cercanos a 5 x 10^{-12} J, se eliminan las partículas sobrantes y se permite que la muestra se estabilice, es decir alcance nuevamente valores cercanos a 5 x 10^{-12} J. Se entiende como partículas sobrantes aquellas cuyo centro de masa se encuentra por encima del límite superior de Molde 1, cuya altura es 12.1 mm.
Figura IV-6: Paso 13'500.000 de la modelación numérica. En este punto de la modelación se han eliminado las partículas sobrantes. El Paso 13'500.000 equivale a 1.35 segundos



Fuente: Elaboración propia

En la siguiente Imagen se observa la muestra lista para ser sometida a la prueba de consolidación. En esta etapa la muestra ha sido comprimida para garantizar que las partículas ubicadas en el límite superior del Molde 1, se ubiquen en su totalidad al interior del mismo, ya que es posible que alguna partícula aunque tenga su centro de masa bajo el límite superior del Molde 1 (con altura de 12.1 mm), también tenga parte de su volumen al exterior del mencionado Molde (Ver Figura IV-6).



Fuente: Elaboración propia.

En la Figura IV-8 se observa el molde usado para consolidar la muestra y someter la misma a pruebas de Corte Directo, cuyas condiciones de frontera se esquematizan en las Figuras IV-10 y IV-11. Por otra parte en la Figura IV-9 se observa la muestra lista para ser consolidada, sin embargo la limitada capacidad de las tarjetas de video usadas no permiten realizar el Render de todas las partículas, por lo que solo se observa el Render de algunas partículas de arena, predominando gran cantidad de puntos que representan partículas de arena e hidrato.

Figura IV-9: Condiciones de frontera en el ensayo de compresión unidimensional con deformación radial nula, donde la compresión se realiza a velocidad constante.





Figura IV-10: Condiciones de frontera en el ensayo de corte directo, donde el corte se realiza a velocidad constante.



En cuanto a la proporción de partículas de arena y metano a insertar se estudia una mezcla compuesta en un 94% de su masa por arena y en un 6% con hidrato, lo cual equivale a insertar 154629 partículas de hidrato de metano y 18559 partículas de arena; esta proporción busca representar una muestra con una saturación con hidrato del 27%.

Por otra parte el paso de tiempo en la etapa de construcción de la muestra (vertimiento de granos en los moldes), es de 1×10^{-7} segundos, sin embargo dicho paso de tiempo varia en la etapa de consolidación y en la etapa de falla, esto con el propósito de disminuir la distancia que una particular puede desplazarse en un único paso de tiempo, y así evitar que por ejemplo las partículas traspasen las paredes del molde en la etapa de compresión unidimensional, o en la etapa de falla de la muestra.

2.2 Compresión unidimensional de la muestra

Una vez construida la muestra el siguiente paso consiste en someterla a una etapa de compresión unidimensional con deformación radial nula. En esta etapa se comprime la muestra en una dirección a través del movimiento de un par de paredes paralelas (por ejemplo paredes con normal z), manteniendo las cuatro paredes restantes fijas (paredes con normal en dirección x e y), ver Figura II-4.

Durante la simulación del ensayo de Compresión se leen los esfuerzos sobre cada triangulo que hace parte de las paredes, y haciendo uso del área de cada triangulo se obtiene la fuerza total aplicada sobre cada una de las paredes que comprimen la muestra, para de esta manera obtener el esfuerzo promedio sobre cada pared. De igual manera se mide la disminución del volumen global de la muestra, y se supone que dicha diminución de volumen solo afecta el espacio ocupado por las partículas que representan el hidrato y el espacio vacío que no es ocupado por el hidrato, o por la arena.

Con la información obtenida durante la prueba de Compresión Unidimensional, es posible construir curvas donde se observa la evolución del esfuerzo normal promedio p', versus el volumen específico ϑ . Un ejemplo de una de estas curvas tomada de la referencia [12] del Capítulo II, es presentada en la Figura IV-12, donde se puede observar una etapa de carga compuesta a su vez por una sub-zona de recompresión y una sub-zona de compresión virgen, y una etapa de descarga.



Figura IV-11: Ejemplo de Diagrama esfuerzo normal versus volumen específico (p', ϑ) .

Fuente: La imagen fue tomada de la referencia [12] del Capítulo II, y se obtuvo al realizar ensayos sobre muestras de caolín.

Como se explicó en el capítulo II, las líneas de compresión virgen como la presentada en la Figura IV-12 son líneas rectas en el espacio $\log p', \vartheta$, y diversos ensayos de laboratorio indican que las líneas de compresión virgen isotrópica, las líneas de compresión virgen anisotrópica, y la línea del estado crítico, tienen la misma pendiente en el plano citado. Igual suposición puede ser aceptada para la pendiente de las líneas de recompresión, aunque en la Figura IV-13 se observa cierta variación.



Figura IV-12: Ejemplo de Diagrama esfuerzo normal versus volumen específico (p', ϑ) .

Fuente: La imagen fue tomada de la referencia [12] del Capítulo II, y se obtuvo al realizar ensayos sobre muestras de caolín.

Es así que de graficas similares a la presentada en la Figura IV-13, se obtendrán los parámetros λ y κ , necesarios para definir la superficie de fluencia del material con base en el modelo Cam Clay, Ver Capitulo II.

2.3 Falla de la muestra

Como fue mencionado anteriormente, la etapa de falla de las muestras se lleva a cabo con pruebas de Corte Directo que tendrán inicio en la última relación (p',q,ϑ) , alcanzada en la primera etapa de consolidación. Estos ensayos tienen el propósito de obtener o calibrar el ángulo de fricción representativo para el material (ángulo de fricción entendido según la mecánica de suelos tradicional), el cual es uno de los parámetros necesarios para la definición del modelo que describe la superficie de fluencia asumida como válida en la presente investigación. Al igual que en la etapa de compresión unidimensional con deformación radial nula, en la etapa de falla se leen los esfuerzos sobre cada triangulo que hace parte de las paredes, y haciendo uso del área de cada triangulo se obtiene la fuerza total aplicada sobre cada una de las paredes que comprimen la muestra. En esta etapa de falla el esfuerzo cortante en cada instante se obtiene al dividir la fuerza que se genera sobre la pared cuya normal es paralela al vector de desplazamiento de la caja de corte en el área de corte. Por otra parte el esfuerzo normal sobre el plano de corte se obtiene al dividir la fuerza total sobre las paredes paralelas al plano de corte, en el área que está en contacto con la muestra.

3. Diseño de los experimentos numéricos

La respuesta mecánica de la muestra presentada gráficamente en la Figura IV-9, es estudiada a través de la simulación numérica de ensayos de Corte Directo y ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula. Por otro lado si se repite varias veces la simulación numérica de un ensayo de Corte Directo o de Compresión Unidimensional, mantenido para ello los mismos valores asignados a las variables del modelo de contacto, y sin varían las condiciones de frontera entre ensayos, se obtiene el mismo resultado sin variación alguna. Es por esta razón que no se hace necesario realizar análisis estadísticos que traten sobre la variabilidad de los resultados para pruebas similares. El primer paso para dar inicio a la simulación de los ensayos numéricos de Corte Directo o de Compresión Unidimensional consiste en calibrar el Modelo Numérico de Elementos Discretos, para lo cual se realiza un análisis de

sensibilidad ante cambios en las variables que rigen el Modelo de Contacto entre partículas. Este análisis de sensibilidad se realiza para cada tipo de ensayo simulado, sin incluir las partículas de hidrato, es decir solo arena, como se muestra en la Tabla IV-2. De esta manera al terminar las simulaciones indicadas en la Tabla IV-2, se debe tener claro el efecto de cada variable del modelo de contacto para los ensayos simulados, y se debe haber calibrado la curva esfuerzo desplazamiento para la arena sin hidrato.

Tabla IV-2: Ensayos usados para estudiar la sensibilidad del modelo frente al cambio en el valor numérico de las variables que hacen parte del Modelo de Contacto, la velocidad de corte y/o la velocidad de compresión de la muestra. **E** representa el Modulo de Young de la partícula, ν representa la Relación de Poisson de la partícula, β representa el Coeficiente de Restitución entre pares de partículas y μ representa el Coeficiente de Fricción entre pares de partículas.

Tino do onsavo	Variables del Modelo	Variable estudiada	Numero de
npo de ensayo	de Contacto	Vallable estudiada	ensayos
Corte Directo	Ε, ν, β, μ	E	2
Corte Directo	Ε, ν, β, μ	ν	2
Corte Directo	Ε, ν, β, μ	β	2
Corte Directo	Ε, ν, β, μ	μ	2
Corte Directo	Ε, ν, β, μ	Velocidad de Corte	2
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	E	2
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	ν	2
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	β	2
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	μ	2
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	Velocidad de Compresión	2

Fuente: Elaboración propia.

Los ensayos presentados en la Tabla IV-2, se realizan sobre una muestra de arena sin hidrato, con 19459 partículas cuyos tamaños son descritos en la Figura IV-16. Esta distribución granulométrica para los granos de arena se repite en la muestra conformada por arena e hidrato que se presenta en la Figura IV-9, aunque en esta ultima las partículas de arena suman 18559, pero la distribución granulométrica para la arena se mantiene gracias a la forma de inserción de las partículas, la cual se realiza por paquetes de partículas que tienen la misma distribución de tamaños y que son asignados por el usuario al programa usado para realizar las simulaciones con el DEM (LIGGGHTS).

Una vez realizada la calibración de la arena y analizada la influencia que las variables del modelo de contacto tienen en los resultados de la Modelación Numérica, se realizan ensayos de Corte Directo y Compresión Unidimensional sobre la muestra de arena e hidrato presentada en la Figura IV-9, sin embargo en esta ocasión y siguiendo las recomendaciones de J. Brugada et al. (Referencia [1] del Capítulo III), <u>se da énfasis en la influencia de la relación de módulos entre partículas y se va más allá al estudiar el efecto de la variación del Coeficiente de Fricción entre partículas, como se puede ver en la Tabla IV-3.</u>

Tabla IV-3: Ensayos realizados sobre la muestra de arena e hidrato. $E_{hidrato}$ representa el Modulo de Young para la partícula de hidrato, E_{arena} representa el Modulo de Young para la partícula de arena, μ_{ha} representa el Coeficiente de Fricción entre pares de partículas de hidrato y arena, μ_{hh} representa el Coeficiente de Fricción entre pares de partículas de hidrato. Variables como la Relación de Poisson ν , y el Coeficiente de Restitución β , no se analizan por considerarse poco relevantes, como se demuestra en el numeral 4 del presente capítulo.

Tine de energe	Variables del Modelo	Veriekle estudiede	Numero de
ripo de ensayo	de Contacto	variable estudiada	ensayos
Corte Directo	Ενβμ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 1\%$	1
	\square, ν, p, μ	$\mu_{ha}=\mu_{hh}=0.025$	
Corte Directo	Ε. ν. β. μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 1\%$	1
	=, <i>v</i> , <i>p</i> , <i>µ</i>	$\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	
Corte Directo	Ε. ν. β. μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 1\%$	1
	, , , p , p	$\mu{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	
Corte Directo	Ε. ν. β. μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 10\%$	1
	, , , p , p	$\mu{ha}=\mu_{hh}=0.025$	
Corte Directo	Ε. ν. β. μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 10\%$	1
	, , , p , p	$\mu{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	
Corte Directo	Ε. ν. β. μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 10\%$	1
	, , , p , p	$\mu{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	
Corte Directo	Ε. ν. β. μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 40\%$	1
	_, _, _, _, _, _, _, _, _, _, _, _, _, _	$\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.025$	
Corte Directo	Ε. ν. β. μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 40\%$	1
	, ,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,	$\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	
Corte Directo	Ε. ν. β. μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 40\%$	1
	_, _, _, _, _, _, _, _, _, _, _, _, _, _	$\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	-
Corte Directo	Ε. ν. β. μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 70\%$	1
	, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	$\mu{ha} = \mu_{hh} = 0.025$	
Corte Directo	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 70\%$	1
		$\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	

Corte Directo	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 70\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	1
Corte Directo	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 100\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.025$	1
Corte Directo	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 100\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	1
Corte Directo	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 100\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 1\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.025$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 1\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 1\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 10\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.025$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 10\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 10\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 40\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.025$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 40\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 40\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 70\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.025$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 70\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 70\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 100\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.025$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 100\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.35$	1
Compresión Unidimensional	Ε, ν, β, μ	$E_{hidrato}/E_{arena} = 100\%$ $\mu_{ha} = \mu_{hh} = 0.75$	1

Fuente: Elaboración propia

4. Ensayos sobre muestras de arena

Como ha sido mencionado a lo largo de este capítulo, el primer paso consiste en calibrar el modelo numérico de Elementos Discretos, para lo cual sus resultados deben lograr reproducir las curvas esfuerzo desplazamiento obtenidas en pruebas de laboratorio sobre muestras reales. Para esto se toma como patrón el trabajo de J.C. Santamarina et al. [1], quienes han publicado los primeros resultados de pruebas de Corte Directo sobre muestras no despresurizadas de sedimentos e hidratos.

Según J.C. Santamarina et al. [1], las pruebas de Corte Directo cuyos resultados se presentan en las Figuras IV-14 y IV-15, son realizadas en múltiples pasos de carga, en los cuales se aplican desplazamientos a velocidad constante en cada uno de ellos, y se permite que la muestra se relaje después de cada paso de carga. En este contexto el permitir que la muestra se relaje después de cada paso de carga, debe entenderse como un proceso intermedio entre pasos de carga, en el cual se ajusta la fuerza normal al plano de corte y se permite que la muestra responda a dicho cambio en la carga durante un periodo de tiempo, lo cual permite mantener un esfuerzo vertical aproximadamente constante durante la ejecución de toda la prueba de Corte Directo que será conformado por múltiples pasos de carga. Este procedimiento se hace necesario ya que durante las pruebas de Corte Directo realizadas por Santamarina et al. [1], el equipo utilizado no podía garantizar que el esfuerzo normal permaneciera constante, y por tanto debía ser ajustado periódicamente durante la prueba.

En la Figura IV-14A se presenta una etapa de relajación de la muestra después del primer paso de carga, donde se puede apreciar como la misma presenta un asentamiento de un poco más de 9 milímetros mientras el esfuerzo normal al plano de corte se trata de mantener a un valor constante de 3 Mpa. Por otra parte en la Figura IV-14B se observa el esfuerzo cortante pico alcanzado en cada paso de carga y representado con un cuadro azul, así como el valor del esfuerzo cortante alcanzado en la etapa de relajación posterior a cada paso de carga.

Los resultados de los ensayos de Corte Directo realizados por J.C. Santamarina et al. [1], de igual manera son presentados en la Figura IV-13, donde se presenta la relación entre el ángulo de fricción movilizado y el desplazamiento de la caja de corte para el caso de la arena con hidrato y el caso de la arena pura. De igual manera en dicha Figura se observa que al final de la etapa de relajación, que se realiza después de cada etapa de carga, la mezcla de arena e hidrato presenta una disminución en el ángulo de fricción movilizado, cuyo valor disminuye hasta alcanzar el ángulo de fricción representativo de la arena pura.

Figura IV-13: A) Variación del esfuerzo vertical durante una etapa de relajación. B) Evolución del esfuerzo cortante durante un ensayo de corte directo



Fuente: J.C. Santamarina et al. [1].

Figura IV-14: Ángulo de fricción movilizado en pruebas de Corte Directo. A) Para mezclas de sedimento con un 27% de saturación con hidrato. B) Para sedimento libre de hidrato.



Fuente: J.C. Santamarina et al. [1].

En la Figura IV-45, los cuadros azules indican el valor pico de la variable en cada paso de carga, y los círculos verdes representan el valor de dicha variable vez la muestra se ha relajado. La muestra ensayada por J.C. Santamarina et al. [1], tenía sección circular con diámetro de 50.8 mm, el esfuerzo vertical fue de 3 Mpa, y el esfuerzo cortante pico fue 2.2 Mpa para la muestra con hidrato y 1.36 Mpa, para la muestra sin hidrato

En el Capítulo II se mencionó que para saturaciones con hidrato mayores al 25%, el principio de los esfuerzos efectivos (Ver Capitulo II), entendido desde el punto de vista

de la mecánica de suelos tradicional, inicia a perder aplicabilidad y el hidrato comienza a cementar los granos de sedimento (ver referencia [4] del Capítulo II y [16] del Capítulo I). Así mismo J.C. Santamarina et al. [1], basados en ensayos de transmisión de ondas, manifiestan que en sedimentos gruesos como las arenas, cuando la saturación con hidrato excede el 40%, este material contribuye con la estabilidad del esqueleto granular conformado por la arena (contribuye a rigidez de la mezcla), pero para el caso donde la saturación con hidrato es inferior al 40%, la rigidez del sedimento es determinada en mayor parte por el estado de esfuerzos efectivos y la historia de esfuerzos del sedimento. Teniendo en cuenta lo enunciado en el párrafo anterior, podría postularse que el comportamiento obtenido por J.C. Santamarina et al. [1] en sus ensayos de Corte Directo, demuestra que para saturaciones con hidrato inferiores al 40%, este material no influye en el ángulo de fricción de la muestra; sin embargo, el comportamiento observado en las Figuras IV-14 y IV-15, puede ser un tanto artificial y solamente valido para la metodología de carga aplicada (pasos de carga y relajación).

4.1 Corte Directo con los parámetros de la Tabla 1 (Arena sin hidrato)

La primera prueba de Corte Directo simulada en esta investigación usando el DEM, se realiza en múltiples etapas de carga, con las cuales se busca garantizar un esfuerzo normal constante en el plano de corte inducido en el ensayo. Estas etapas de carga se asemejan a las realizadas por J.C. Santamarina et al. [1], para la obtención de las relaciones esfuerzo deslazamiento presentadas en la Figura IV-15, y la razón para su implementación en la simulación numérica, es que al igual que en los ensayos físicos realizados por J.C. Santamarina, la versión de LIGGGHTS que se usó para adelantar la modelación numéricas haciendo uso del DEM, no permite imponer una carga constante sobre las paredes de la caja de corte cuando para esto es necesario que la pared se mueva en cualquiera de los dos sentidos de aplicación de la carga, lo cual comúnmente ocurre durante una prueba de corte real, ya que en este tipo de ensayos la muestra se comprime o expande en dirección normal al plano de corte, cuando el esfuerzo sobre el mismo se mantiene constante.

En esta primera simulación del ensayo de Corte Directo, se utilizan los parámetros presentados en la Tabla 1, y esferas con un radio que variara entre 0.24 mm y 0.33 mm para representar la arena como se puede ver Figura IV-16.



Figura IV-15: Distribución granulométrica de las esferas con las cuales se representan las partículas de arena. La muestra está conformada por 19459 esferas.

Fuente: Elaboración propia.

La velocidad de Corte de la muestra es de 0.005 m/s, y se impone a la misma a través del movimiento de las paredes de la caja de corte, sin embargo la componente de velocidad normal a las paredes paralelas al plano de corte, se varía manualmente para cada paso de carga de la simulación, con lo cual se logra mantener un esfuerzo normal aproximadamente constante sobre el plano de corte, cuyo valor durante el ensayo numérico se presenta gráficamente en la Figura IV-17, donde cada punto representa una etapa de corte.

Como se observa en la Figura IV-15, J.C. Santamarina et al. [1], han realizado aproximadamente 12 pasos de carga para alcanzar un porcentaje de desplazamiento en la etapa de corte cercano al 20 %, sin embargo en los ensayos numéricos aquí presentados, es necesario realizar 256 etapas de carga para alcanzar el mismo porcentaje de desplazamiento, esto en razón a los continuos cambios en el esfuerzo normal presente en el plano de corte durante el ensayo numérico, como se ejemplifica en la Figura IV-17.

Por otra parte no se han realizado las etapas de relajación aplicadas a la muestra tras cada etapa de carga, según el procedimiento seguido por J.C. Santamarina et al. en la referencia [1].

Figura IV-16: Evolución del esfuerzo normal en el plano de corte, durante el desplazamiento de la caja de corte. Rango de desplazamiento de 0.5 mm a 1 mm. El esfuerzo normal promedio es de 1922088.537 Pascales.



Fuente: Elaboración propia.

En la Figura IV-17 se observan 40 etapas de carga aplicadas para desplazar la muestra, desde 0.5 mm a 1 mm (cada punto representa una etapa de carga). Cada uno de los puntos que conforman la gráfica se obtuvo modificando la velocidad y/o dirección con la que se comprime o disminuye la fuerza aplicada sobre las paredes paralelas al plano de corte inducido en la muestra durante la prueba de Corte Directo. En cada etapa de carga se obtienen los esfuerzos sobre las paredes de la Caja de Corte, lo cual permite obtener curvas como la presentada en la Figura IV-18.

En la Figura IV-18 la curva color naranja es obtenida a partir de la simulación numérica de un ensayo de Corte Directo usando el DEM, así como con el empleo de los parámetros de la Tabla IV-1, los cuales han sido reportados en las referencias bibliográficas citadas en el Capítulo III. Esta simulación del ensayo de Corte Directo se realiza mantenido un esfuerzo normal sobre el plano de corte de aproximadamente 1922088.537 Pascales. Por otra parte las dos curvas restantes son las reportadas por J.C. Santamarina et al. [1], y las mismas se repiten con el propósito de comparar lo obtenido en las simulaciones numéricas realizadas en al presente investigación, con los resultados experimentales que representan dichas curvas, las cuales se identifican como C_1 para el caso en que la muestra contiene hidrato, y C_2 para el caso en que la muestra está conformada únicamente por arena.

Figura IV-17: Resultados de la simulación de un ensayo de Corte Directo, y resultados experimentales, curvas C_1 y C_2 , reportados por J.C. Santamarina et al. [1]. El esfuerzo normal promedio sobre el plano de corte en las simulaciones con el DEM fue 1922088.537 Pascales.



Fuente: Elaboración propia. Curvas C1 y C2 reportadas por J.C. Santamarina et al. [1]

El objetivo de realizar comparaciones como las presentadas en la Figura IV-18, es verificar si la curva naranja coincide con la curva azul C₂, la cual muestra el desarrollo experimental del ángulo de fricción para la muestra real de arena sin hidrato. Es así que al comparar los resultados de la modelación numérica con la información experimental, se observa que el valor experimental obtenido en laboratorio para la muestra real de arena, es apenas el 65.33% del valor obtenido con la simulación numérica con el DEM. En este punto se hace evidente la necesidad de variar los parámetros del modelo de contacto entre partículas a fin de lograr la paridad buscada entre el modelo numérico y la información experimental. Es pertinente señalar que en gran cantidad de publicaciones donde se estudia el comportamiento mecánico de medios particulados, se concuerda que las propiedades mecánicas del medio son fuertemente influenciadas por las condiciones de frontera del ensayo, y las características particulares del material, como por ejemplo la forma de la partícula.

El modelo de contacto seleccionado e implementado haciendo uso de LIGGGHTS (Ver Capitulo III), se basa en cuatro variables, Modulo de Young, Relación de Poisson, Coeficiente de Restitución y Coeficiente de Fricción, por lo que para calibrar el modelo numérico se necesita conocer el grado de influencia de cada una de las variables de interés en la respuesta mecánica del material simulado. Con el propósito de dar celeridad al proceso de calibración, esta etapa se realiza con ensayos de Corte Directo a volumen global constante, donde el esfuerzo normal en el plano de corte varía continuamente. Este procedimiento es totalmente válido ya que para estudiar la influencia de las variables, Modelo de Young, Relación de Poisson, Coeficiente de Restitución y Coeficiente de Fricción, no es necesario garantizar un esfuerzo normal constante sobre el plano de corte inducido en la prueba. Así mismo se estudia el posible efecto de usar un esfuerzo normal constante o variable en la prueba de Corte Directo en relación con el Angulo de Fricción desarrollado. De igual manera se revisa el efecto de la velocidad de corte.

Teniendo en cuenta lo anterior, en las Figuras IV-19, IV-20, IV-21, IV-22, IV-23 y IV-24, se presenta relación entre el ángulo de fricción desarrollado con el desplazamiento de la caja de corte para ensayos de Corte Directo, en los cuales se evalúa la influencia del coeficiente de fricción, el coeficiente de restitución, la relación de poisson, el módulo de Young, la velocidad de corte y el efecto del esfuerzo normal.



Figura IV-18: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus desplazamiento, para un cambio de 0.4 en el coeficiente de fricción.

Línea	Módulo de Young	Relación Poisson	Coeficiente Restitución	Coeficiente fricción			
Negra	3 x 10 ⁸ Pascales	0.2	0.75	0.1			
Amarilla	3 x 10 ⁸ Pascales	0.2	0.75	0.5			
Fuente: Elaboración propia, Curvas C1 y C2 reportadas por J C. Santamarina et al. [1]							

La influencia del coeficiente de fricción entre partículas se hace evidente al observar la diferencia entre la curva negra y la curva amarilla en la Figura IV-19, las cuales representan la relación entre el ángulo de fricción movilizado y el desplazamiento de la caja de corte para simulaciones numéricas de ensayos de Corte Directo usando el DEM, y coeficientes de fricción de 0.1 y 0.5 respectivamente. Por otra parte la línea azul representa los resultados de ensayos de laboratorio sobre una muestra real de arena sin hidrato, y la línea roja los resultados para una muestra real de arena e hidrato; estas dos curvas, C₁ y C₂, son las reportadas por J.C. Santamarina et al. [1].

Como se puede observar en la Figura IV-19, la influencia del coeficiente de fricción en la relación entre el ángulo de fricción movilizado y el desplazamiento, es significativa e incluso el valor de dicho parámetro puede generar un cambio abrupto en la respuesta del material. Es así que a bajos valores del coeficiente de fricción el material parece presentara endurecimiento con el aumento en el desplazamiento, y a grandes valores del coeficiente de fricción, parece comportarse como un material que ablanda con el incremento en el desplazamiento.



Figura IV-19: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus desplazamiento, para un cambio de 0.5 en el coeficiente de restitución.

Línea	Módulo de Young	Relación Poisson	Coeficiente Restitución	Coeficiente fricción
Negra	3 x 10 ⁸ Pascales	0.2	0.75	0.35
Amarilla	3 x 10 ⁸ Pascales	0.2	0.25	0.35

Fuente: Elaboración propia. Curvas C1 y C2 reportadas por J.C. Santamarina et al. [1]

Figura IV-20: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus desplazamiento, para un cambio de 0.19 en el coeficiente de poisson.



Línea	Módulo de Young	Relación Poisson	Coeficiente Restitución	Coeficiente fricción		
Negra	3 x 10 ⁸ Pascales	0.2	0.75	0.1		
Amarilla	3 x 10 ⁸ Pascales	0.01	0.75	0.1		

Fuente: Elaboración propia. Curvas C1 y C2 reportadas por J.C. Santamarina et al. [1]





Fuente: Elaboración propia. Curvas C1 y C2 reportadas por J.C. Santamarina et al. [1]



Figura IV-22: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus desplazamiento, para un cambio de 0.004 m/s en la velocidad de corte de la muestra.

0.75

0.5

0.2

0.005 m/s

3 x 10⁸ Pascales

Negra

La influencia del coeficiente de restitución, la relación de poisson, el módulo de Young y la velocidad de corte de la muestra, respecto al desarrollo del ángulo de fricción con el desplazamiento de la caja de corte, es notable al observar la diferencia entre la curva negra y la curva amarilla en la Figura IV-20, IV-21, IV-22 y IV-23, las cuales representan la relación entre el ángulo de fricción movilizado y el desplazamiento de la caja de corte para simulaciones numéricas de ensayos de Corte Directo usando el DEM. En estas figuras la línea azul representa los resultados de ensayos de laboratorio sobre una muestra real de arena sin hidrato, y la línea roja los resultados para una muestra real de arena e hidrato; estas dos curvas, C₁ y C₂, son las reportadas por J.C. Santamarina et al. [1].

Como se puede observar en la Figura IV-20, IV-21, IV-22 y IV-23, la influencia del coeficiente de restitución, la relación de poisson, el módulo de Young y la velocidad de corte de la muestra, no es significativa e incluso las curvas parecen sobreponerse con algunas pequeñas diferencias, resaltándose el caso del módulo de Young, para el cual incluso es necesario mover un tramo final de la curva amarilla para así poder visualizarla.

Amarilla3 x 108 Pascales0.20.750.50.001 m/sFuente: Elaboración propia. Curvas C1 y C2 reportadas por J.C. Santamarina et al. [1]

Teniendo en cuenta lo expresado en el párrafo inmediatamente anterior, se demuestra que en la simulación de ensayos de Corte Directo, donde las partículas se mueven a velocidades muy bajas, y el modelo reológico de contacto es el mismo que se ha usado en la presente investigación, no tiene sentido realizar estudios profundos para establecer el valor del coeficiente de restitución, la relación de poisson, el módulo de Young y la velocidad de corte con que debe ser llevada la muestra a la falla; esto si lo que se quiere es reproducir la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus el desplazamiento de la caja de corte.

Figura IV-23: Variación de la relación entre el ángulo de fricción movilizado versus desplazamiento, para un ensayo con esfuerzo normal constante, y otro ensayo con esfuerzo normal variable.



F	-1-1	0			a famo a n'or a la fal fal
Amarilla	3 x 10 ⁸ Pascales	0.01	0.2	0.1	Variable
nogiu		0.01	0.2	0.1	0010001 0000100



Mediante la simulación de un ensayo de Corte Directo en el cual se mantiene aproximadamente constante el esfuerzo normal sobre el plano de corte, y un ensayo de Corte Directo en el cual el esfuerzo normal sobre dicho plano varía durante toda la prueba, se puede comprobar que la relación entre el ángulo de fricción movilizado y el desplazamiento de la caja de corte, no se ve afectada por el tipo de ensayo que se realice, sea este con esfuerzo normal constante sobre el plano de corte, o con esfuerzo normal variable, lo cual se puede apreciar en la Figura IV-24, donde para poder visualizar la línea amarilla fue necesario mover arbitrariamente dos de sus puntos. Esta particularidad permite que los ensayos de Corte Directo que se realizan sobre mezclas de arena e hidrato, puedan ejecutarse a volumen constante, ahorrando de esta manera tiempo y evitado un desgaste computacional innecesario, que sería inevitable si se toma la decisión de realizar ensayos de Corte Directo con esfuerzo normal constante.

Con el estudio de sensibilidad de variables representado gráficamente en la Figura IV-19, IV-20, IV-21, IV-22 y IV-23, se concluye que el parámetro a calibrar para lograr un buen ajuste entre los resultados experimentales reportados por J.C. Santamarina et al. [1], y las simulaciones numéricas de las pruebas de Corte Directo realizadas con LIGGGHTS, es el coeficiente de fricción. Un aspecto a resaltar de las muestras ensayadas por J.C. Santamarina et al. [1], es que las mismas contienen arcilla esmectita en aproximadamente el 12% en peso, lo que en parte justifica su bajo Angulo de Fricción [1].

Mediante la simulación de múltiples ensayos de Corte Directo, se logró establecer un valor del coeficiente de fricción de 0.025 para la muestra de arena sin hidrato como se puede ver en la Figura IV-25, donde se presenta la curva C₂ reportada por J.C. Santamarina et al. [1], y la curva amarilla que es la obtenida usando el DEM. El valor del coeficiente de fricción seleccionado para la arena pude parecer muy bajo, pero de acuerdo a lo mencionado en el párrafo anterior, refleja la presencia de arcilla esmectita en la muestra.

Como se observa en las Figuras IV-19, IV-20, IV-21, IV-22, IV-23 y IV-24, en la simulación numérica del ensayo de Corte Directo solo el coeficiente de fricción afecta de manera significativa el ángulo de fricción desarrollado. <u>Sin embargo en dichas simulaciones numéricas se encontró que los esfuerzos sobre las paredes de la caja de corte se ven seriamente afectados por la variación en el Coeficiente de Fricción, la Relación de Poisson y el Módulo de Young</u>, razón por la cual se hace clara la necesidad de realizar pruebas numéricas de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, donde se evalúe la influencia de los parámetros usados en el modelo de contacto, Modelo de Young, Relación de Poisson, Coeficiente de Restitución y Coeficiente de Fricción. La velocidad de compresión en la muestra en las pruebas de Compresión Unidimensional es de 0.005 m/s.

Figura IV-24: Relación entre el ángulo de fricción movilizado versus desplazamiento. La curva amarilla es la seleccionada para la arena sin hidrato.



		_	FOISSOIL	Restitucion	Inccion	
	Amarilla	2.86 x 10 ⁸ Pascales	0.4	0.2	0.025	Variable
F	Fuente: F	laboración propia	Curvas C1	v C2 reportada	s por J C Sa	ntamarina et al [1]

Según el artículo publicado por J.C. Santamarina et al. [1], la arena cuya relación Ángulo de Fricción-Desplazamiento se presenta en la Figura IV-15, proviene de un núcleo identificado como 20P, para el que no se presenta gráfica de Compresión Unidimensional (relación de vacíos versus esfuerzo normal), sin embargo en el citado artículo se presenta la gráfica de compresión para una muestra identificada como 8P, la cual proviene del mismo deposito que la muestra 20P y se caracteriza por presentar un Coeficiente de Compresión de 0.25 y un Coeficiente de Recompresión de 0.034 (C_c y C_r respectivamente, Ver Figura IV-26).

Como fue mencionado en párrafos anteriores, las muestras provienen de la Fosa de Nankai en el mar de Japón. Así mismo es necesario aclarar que el núcleo identificado como 8P, fue extraído del tercio superior del depósito y el núcleo 20P del tercio inferior del citado depósito, cuyo espesor se extiende por 300 metros bajo el nivel del lecho marino; este depósito es supra-yacido por una columna de agua de 1000 metros. La muestra 20P tiene una saturación con hidrato del 27%, mientras que la muestra 8P tiene una saturación con hidrato del 18%, y para esta última J.C. Santamarina et al. [1], presentan la curva de Relación de Vacíos versus Esfuerzo Normal para el sedimento sin hidrato; curva que es reproducida en la Figura IV-26.



Figura IV-25: Relación de Vacíos versus Presión Normal - muestra 8P (Arena suelta).

Fuente: Imagen reproducida de J.C. Santamarina et al. [1].

Como se observa en la Figura IV-26, la muestra 8P tiene una relación de vacíos inicial de 0.88, que es mayor a la relación de vacíos de la muestra aquí modelada, cuya relación de vacíos inicial es de 0.601. Por otra parte a continuación se presentan ensayos de Consolidación Unidimensional, a fin de concluir la calibración del sedimento sin hidrato.



Figura IV-26: Relación de Vacíos versus Presión Normal.

Línea	Módulo de Young	Relación Poisson	Coeficiente Restitución	Coeficiente fricción	Coeficiente de Recompresión	Coeficiente de Compresión
Azul	2.86 x 10 ⁸ Pascales	0.5	0.75	0.75	0.0167	0.1838
Naranja	2.86 x 10 ⁸ Pascales	0.1	0.75	0.75	0.0168	0.1842

Fuente: Elaboración propia.



Figura IV-27: Relación de Vacíos versus Presión Normal.

Línea	Módulo de Young	Relación Poisson	Coeficiente Restitución	Coeficiente fricción	Coeficiente de Recompresión	Coeficiente de Compresión		
Azul	2.86 x 10 ⁸ Pascales	0.5	0.75	0.75	0.0167	0.1838		
Naranja	2.86 x 10 ⁸ Pascales	0.5	0.2	0.75	0.0166	0.1838		

Fuente: Elaboración propia.





Línea	Módulo de Young	Relación Poisson	Coeficiente Restitución	Coeficiente fricción	Coeficiente de Recompresión	Coeficiente de Compresión
Azul	2.86 x 10 ⁸ Pascales	0.5	0.75	0.75	0.0167	0.1838
Naranja	2.86 x 10 ⁸ Pascales	0.5	0.75	0.025	0.0210	0.2418

Fuente: Elaboración propia.



Figura IV-29: Relación de Vacíos versus Presión Normal.

Línea	Módulo de Young	Relación Poisson	Coeficiente Restitución	Coeficiente fricción	Coeficiente de Recompresión	Coeficiente de Compresión
Azul	2.86 x 10 ⁸ Pascales	0.5	0.75	0.75	0.0167	0.1838
Naranja	5 x 10 ⁶ Pascales	0.5	0.75	0.75	0.0119	0.1827

Fuente: Elaboración propia.

Como se puede observar en la Figura IV-27, la variación de la Relación de Poisson trae consigo un cambio leve en la curva que representa la correspondencia entre la Relación de Vacíos y el Esfuerzo, obteniéndose menores esfuerzos, para la misma relación de vacíos, a menor Relación de Poisson; por lo que la manipulación de este parámetro puede ser útil para afinar la calibración. Como se ve en la Figura IV-28 el Coeficiente de Restitución no presenta influencia en la relación citada. De igual manera la Figura IV-28 deja ver el efecto de la variación en la velocidad de compresión en el rango de velocidades estudiado, ya que los ensayos presentados en la Figura 4-28 se repitieron a velocidades de 0.05 m/s y 0.005 m/s, obteniéndose superposición de curvas, lo cual coincide con lo reportado por Cheng, Y. P et al. (Referencia [8] del capítulo III).

Una de las variables de mayor importancia tanto en el ensayo de Compresión Unidimensional como en el ensayo de Corte Directo, es el Coeficiente de Fricción, que a valores bajos genera Ángulos de Fricción bajos, así como valores altos del Coeficiente de Compresión y el Coeficiente de Recompresión, sin embargo se recuerda que dicho valor ya fue calibrado en el Ensayo de Corte Directo y por tal razón no será modificado en esta etapa de la Calibración (Ver Figura IV-25).

En la Figura IV-30 se observa que el Módulo de Young principalmente traslada la curva en dirección horizontal en el plano $log(p'), \vartheta$, sin embargo también se observa que a menores valores del Módulo de Young, se obtiene menores valores del Coeficiente de Recompresión.

El paso a seguir es lograr que para la muestra simulada en el modelo numérico usando el DEM, el esfuerzo de Pre-consolidación sea cercano a 15 Mega pascales, valor que trata de reproducir los esfuerzos a los que se encuentra sometida la muestra 8P en el tercio inferior del depósito de hidratos en la Fosa de Nankai en el mar de Japón.

En este punto se hace evidente una gran debilidad del Método de los Elementos Discretos con partículas esféricas, que probablemente el lector ya ha puntualizado. <u>Es así que en el proceso de construcción de la muestra resulta muy difícil e incluso imposible reproducir una relación de vacíos alta, que sea representativa de un medio granular con una distribución granulométrica dada</u>. Como ejemplo tomemos la presente investigación, donde la muestra de arena construida con la ayuda del DEM, tiene una relación de vacíos cercana a 0.6 al inicio de la etapa de compresión unidimensional, sin embargo la muestra 8P que se encontraba ubicada aproximadamente a 250 metros bajo el nivel del lecho marino en la Fosa de Nankai, y bajo una columna de 1000 metros de agua, tiene una relación de vacíos de 0.87 a una presión de 6 MPa.

Con base en lo anterior se hace visible que en las pruebas de Corte Directo simuladas usando el DEM, la muestra numérica es más densa que la muestra real ensayada por J.C. Santamarina et al. [1], <u>y por tanto los valores bajos del coeficiente de fricción usado para poder construir la curva presentada en la Figura IV-25, también tienen su origen en la alta densidad de la muestra numérica, y su incapacidad para representar con un buen grado de aproximación la relación de vacíos de la muestra real. Este análisis puede ser extendido al caso del ensayo de Compresión Unidimensional donde aún es mucho más evidente la influencia de la relación de vacíos, ya que esta es una de las variables medidas en las pruebas.</u>

Teniendo en cuenta que el principal efecto del módulo de Young en las simulaciones de los ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, es trasladar la curva en dirección horizontal en el plano $\log(p')$, ϑ , se ha optado por incrementar el valor de dicho módulo a 8000 Mega Pascales, con lo cual se logra que el esfuerzo de Pre-consolidación aproximado sea 15 Mega pascales, siendo este un valor estimativo que podría diferir en gran medida del valor real, pero que se estima posible, ya que en los 250 metros de sedimentos que subrayasen el punto de donde se extrajo la muestra 8P, pueden existir estratos colmatados que no permitan la entrada de agua hacia niveles inferiores.

La muestra de sedimentos libres de hidratos cuya relación entre Esfuerzo y Relación de Vacíos se presenta en la Figura IV-26, tiene un Coeficiente de Compresión y un Coeficiente de Recompresión de 0.25 y 0.034 respectivamente. Al observar la Figura IV-31, se encuentra que en el Modelo Numérico el Coeficiente de Compresión es sobreestimado aproximadamente 1.5 veces, y el Coeficiente de Recompresión es sobrestimado aproximadamente 5.5 veces.

En pruebas complementarias se encontró que dicha sobrestimación disminuye al incrementar el coeficiente de fricción entre partículas, el cual es bastante bajo en la modelación numérica ya que como se dijo anteriormente, la muestra ensayada en laboratorio tenia aproximadamente un 12% de contenido de arcilla [1], y dicho material es imposible de simular empleado esferas rígidas como las usadas para representar la arena. De igual manera se debe recordar que la muestra numérica es más densa que la muestra real.

En la Figura IV-31 la primera etapa de carga es representa con la serie de puntos en color azul, la primera etapa de descarga con puntos en color negro, la segunda etapa de carga con puntos en color amarillo, la segunda etapa de descarga con puntos en color verde y la tercera etapa de carga con puntos en color rojo.

Por otra parte en la Figura IV-26 los extremos de la línea de Compresión Virgen se ubican en las siguientes coordenadas del plano definido por la Relación de Vacíos y el Logaritmo en Base 10 de la presión.





	Módulo de Young	Relación Poisson	Coeficiente Restitución	Coeficiente fricción		
	8 x 10 ⁹ Pascales	0.4	0.2	0.025		
Fuente: Elaboración propia.						

Tabla IV-4: Coordenadas de la línea de Compresión Virgen en la Figura IV-24.

Relación de vacíos	Presión (MPa)	
0.8715	6.1	
0.823	9.4	

Fuente: Elaboración propia.

Al proyectar la línea de Compresión Virgen que se muestra en la Figura IV-31, se obtienen las siguientes presiones, las cuales son aproximadamente el 50% de las presiones presentadas en la Tabla IV-5. Esto de nuevo hace evidente la influencia de la diferencia de densidades entre la muestra real y la muestra numérica.

 Tabla IV-5: Coordenadas proyectadas de la línea de Compresión Virgen en la Figura

 IV-29.

Relación de vacíos	Presión (MPa)	
0.8715	3.659	
0.823	4.743	

Fuente: Elaboración propia.

A pesar de las discrepancias entre los valores presentados en la Tabla IV-4 y la Tabla IV-5, se observa que el Módulo de Young usado para obtener la curva presentada en la Figura IV-31, se encuentra en el orden de magnitud para la arena estudiada y que este es 28 veces mayor al indicado en la Tabla IV-1.

En este punto queda claro que con el presente trabajo no se busca reproducir fielmente el comportamiento de la arena patrón, pero si encontrar algunas tendencias de comportamiento, que sean visibles bajo las limitantes de la modelación adelantada.

Las diferencias se pueden deber a incongruencias en la granulometría y composición de la muestra real y la muestra simulada, falta de paridad entre la forma de las partículas reales y las partículas numéricas lo cual no permite simular relaciones de vacíos altas, un paso de tiempo susceptible de refinamiento y demás.

La arena ensayada por J.C. Santamarina et al. [1], para obtener la Figura IV-26, podría ser descrita como una arena suelta de acuerdo a su Relación de Vacíos inicial, como se puede ver en la Figura IV-32.

Por otra parte la arena simulada en el Modelo Numérico podría ser vista como un material compacto, por lo que se esperaría que los Coeficientes de Compresión y de Recompresión sean menores en la arena compacta respecto a los valores de dichos coeficientes en la arena suelta, situación que no se reprodujo en el modelo.

A pesar de las discrepancias expuestas en párrafos anteriores, se observa que la diferencia entre el valor numérico del Coeficiente de Compresión y el Coeficiente de Recompresión obtenido para la arena compacta simulada, no es tan marcada con en el caso de la arena suelta, lo cual comúnmente se observa en materiales reales, como se aprecia en la Figura IV-32.

En las Figuras IV-33, IV-34, IV-35, IV-36 y IV-37, se presentan los Coeficientes (K_0), entendidos como la relación entre el esfuerzo lateral y esfuerzo axial (σ_r/σ_a).



Figura IV-31: Relación de Vacíos versus Presión Normal, para muestras de arena fina.

Fuente: Imagen Tomada de Juárez Badillo – Rico Rodríguez [2].

Figura IV-32: Evolución del coeficiente K_0 con el volumen específico. Primera etapa de Carga.



Figura IV-33: Evolución del coeficiente K_0 con el volumen específico. Primera etapa de Descarga.



Figura IV-34: Evolución del coeficiente K_0 con el volumen específico. Segunda etapa de Carga.

Figura IV-35: Evolución del coeficiente K_0 con el volumen específico. Segunda etapa de Descarga.



Figura IV-36: Evolución del coeficiente K_0 con el volumen específico. Tercera etapa de Carga.



Fuente: Elaboración propia.

La Figura IV-38 ha sido obtenida a partir de ensayos de Compresión Unidimensional, pero principalmente se ha usado la última etapa de Descarga y la última etapa de Carga que se presenta en la Figura IV-31. De esta manera para la arena libre de hidrato, se tiene un Ángulo de Fricción de 25 grados, un parámetro λ de 0.1653, un parámetro κ de 0.1148, y un volumen específico ϑ_{λ} sobre la línea de compresión virgen anisotrópica, para una presión de 1 MPa, de 2.002.

Figura IV-37: Volumen especifico versus Logaritmo de la Presión Normal para la muestra de arena sin hidrato. Las pendientes λ y κ , son los valores buscados para definir la superficie de fluencia de la arena según el modelo CamCay



Módulo de Young	Relación Poisson	Coeficiente Restitución	Coeficiente fricción
8 x 10 ⁹ Pascales	0.4	0.2	0.025

Fuente: Elaboración propia.

5. Ensayos sobre mezclas de arena e hidrato

En el numeral 4 del presente capítulo se calibran las partículas esféricas que representan la arena, lo cual se logra al hacer uso de los datos experimentales reportados por J.C. Santamarina et al. [1], y las simulaciones numéricas de ensayos de Corte Directo y ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, que han sido realizados en la presente investigación usando el programa de código abierto LIGGGHTS, a través del cual se ha implementado el DEM. Con el desarrollo de la calibración de las partículas que representan la arena, <u>se obtuvo para las mismas un coeficiente de fricción entre granos de arena de 0.025 y un módulo de Young de 8 x 10⁹ Pascales, el cual permanecerá constante en las simulaciones de la <u>respuesta mecánica de la mezcla de arena e hidrato que se desarrollan en el presente numeral</u>.</u>

Por otra parte se encontró que para los ensayos simulados, el efecto del coeficiente de restitución, la velocidad de corte, o la velocidad de compresión de la muestra, son poco relevantes, lo cual también puede ser extendido al caso del coeficiente de

poisson, que aunque presentó algo de influencia en la respuesta del material, la misma fue poco significativa.

Hasta este punto el paso de tiempo usado en la modelación numérica ha sido de 1 x 10⁻⁷ segundos, sin embargo al incluir las partículas de hidrato, es necesario disminuir el paso de tiempo en concordancia con el tamaño del grano de hidrato, e incluso es necesario disminuir dicho paso de tiempo aún más, cuando el Módulo de Young del hidrato se incrementa de un valor A hacia un valor B.

En este numeral y mediante modelaciones numéricas de ensayos de Corte Directo, se busca conocer la influencia que la adición de partículas de hidrato tiene en el desarrollo del Ángulo de Fricción, lo cual se aprecia gráficamente en las Figuras IV-39 y IV-40. Es así que para la mezcla estudiada, representada en la Figura IV-9, <u>se realizan cinco simulaciones de ensayos de Corte Directo, para cada uno de los tres Coeficientes de Fricción que se ha decidió asignar al hidrato con el propósito de estudiar su influencia en la respuesta mecánica de la mezcla de arena e hidrato.</u>

De esta manera los 3 coeficientes de fricción asignados a las partículas de hidrato son 0.025, 0.35 y 0.75, y para cada uno de ellos se realizan ensayos de Corte Directo con 5 diferentes relaciones de módulos entre las partículas de hidrato y las partículas de arena $(E_{Hidrato}/E_{Arena})$, a saber 1%, 10%, 40%, 70% y 100%. Por ejemplo para el Coeficiente de Fricción de 0.025 que se asigna a las partículas de hidrato, el primer Corte Directo se realiza con una relación de módulos del 1% $(E_{Hidrato}/E_{Arena})$, el segundo con una relación de módulos del 10%, el tercero con una relación de módulos del 40%, el cuarto con una relación de módulos del 70% y el quinto con una relación de módulos del 100%. Un procedimiento similar es realizado para el Coeficiente de Fricción de 0.35 y 0.75.

En los ensayos de Corte Directo mencionados en el párrafo anterior, no se observó mayor variación en la respuesta mecánica del material a grandes desplazamientos, donde se supone que el Ángulo de fricción a usarse en el modelo CamClay, se ha desarrollado completamente. Por esta razón solo se presentan 2 graficas representativas de las condiciones extremas, donde se pueden apreciar las tendencias generales de comportamiento.

Como se observa en la Figura IV-37, para una relación de módulos del 1%, y 2 valores extremos del coeficiente de fricción asignado a las partículas de hidrato, la relación entre el Ángulo de Fricción movilizado y el desplazamiento de la caja de corte, no sufre mayor variación respecto a la curva obtenida para la arena sin hidrato que es reportada por Santamarina [1], por lo que el Ángulo de Fricción a grandes desplazamientos sigue siendo 25 grados. Por otra parte para las relaciones de módulos del 10%, 40%, 70% y 100%, Coeficientes de Fricción asignados a las partículas de hidrato de 0.35 y 0.75, y desplazamientos de la caja de corte menores al 8%, se presenta un incremento en el valor numérico del Ángulo de Fricción desarrollado, sin embargo para desplazamientos superiores al 10%, el Ángulo de Fricción vuelve a los 25 grados obtenidos para el caso de arena sin hidrato, como se ejemplifica en la Figura IV-40.

Teniendo en cuenta que el interés principal de la investigación se centra en el comportamiento de una mezcla de arena e hidrato a grandes desplazamientos y/o deformaciones, no se profundizará en el análisis de la relación encontrada entre el Ángulo de Fricción desarrollado y desplazamiento para valores de este último inferiores al 10%, sin embargo en la Figura IV-40, se presenta una de las Figuras como ejemplo demostrativo del comportamiento observado.





Fuente: Elaboración propia. Curvas C1 y C2 reportadas por J.C. Santamarina et al. [1]

En la Figura IV-39 la línea verde representa la relación entre el Ángulo de Fricción y el Desplazamiento de la caja de corte para la arena sin hidrato y un Coeficiente de Fricción de 0.025; esta curva ha sido calibrada en el numeral 4 del presente capítulo.

Por otra parte la línea negra representa la relación entre el Ángulo de Fricción y el Desplazamiento de la caja de corte para la arena con hidrato, una relación de módulos de 1%, un Coeficiente de Fricción entre partículas de arena de 0.025, entre arena e hidrato de 0.025 y entre partículas de hidrato de 0.025. La línea naranja representa la relación entre el Ángulo de Fricción y el Desplazamiento de la caja de corte para la arena con hidrato, una relación de módulos de 1%, un Coeficiente de Fricción y el Desplazamiento de la caja de corte para la arena con hidrato, una relación de módulos de 1%, un Coeficiente de Fricción entre partículas de arena de 0.025, entre arena e hidrato de 0.75 y entre partículas de hidrato de 0.75 y entre partículas de hidrato de 0.75. En la Figura IV-39 se observa que cuando la relación de módulos es 1%, el coeficiente de fricción asignado a las partículas de hidrato no presenta influencia en el desarrollo del ángulo de fricción, lo cual sucede de manera independiente al valor que se asigne al coeficiente de fricción del hidrato.

Figura IV-39: Ángulo de fricción movilizado versus % de Desplazamiento de la caja de corte, para una relación de módulos de 100% y un coeficiente de fricción asignado al hidrato de 0.75.



Fuente: Elaboración propia. Curvas C1 y C2 reportadas por J.C. Santamarina et al. [1]

En la Figura IV-40 la línea verde representa la relación entre el Ángulo de Fricción y el Desplazamiento de la caja de corte para la arena sin hidrato y un Coeficiente de Fricción de 0.025. Por otra parte la línea naranja representa la relación entre el Ángulo de Fricción y el Desplazamiento de la caja de corte para la arena con hidrato, una relación de módulos de 100%, un Coeficiente de Fricción entre partículas de arena de 0.025, entre arena e hidrato de 0.75 y entre partículas de hidrato de 0.75.

Como se observa en la Figura IV-40, cuando la relación de módulos se incrementa, es decir cuando el valor del módulo de Young asignado al hidrato se acerca al valor del módulo de Young de la arena, la mezcla de arena e hidrato pasa a presentar un comportamiento típico de un material que ablanda por deformación, pero para desplazamientos mayores al 10%, el valor del ángulo de fricción desarrollado con el desplazamiento de la caja de corte tiende nuevamente a los 25 grados que caracterizan la arena sin hidrato.

Teniendo en cuenta lo anterior, se confirma lo expuesto por Santamarina et al. [1], quienes manifiestan que para saturaciones con hidrato menores al 40%, este material no influye en la repuesta mecánica de la mezcla de arena e hidrato, y que el ángulo de fricción desarrollado y representado por la curva C₁, tiende a ser el representado por la curva C₂, que a su vez representa la respuesta mecánica de la arena sin hidrato.

Al igual que para el caso de la arena sin hidrato, el estudio de la compresibilidad de la mezcla de arena e hidrato se realiza con la simulación de ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, retomando para ello la metodología usada en la simulación de los ensayos de Corte Directo que se describen en los párrafos inmediatamente anteriores. Es decir que se realizan ensayos de Compresión Unidimensional para cada uno de los 3 coeficientes de Fricción estudiados 0.025, 0.035 y 0.75; ensayos que se repiten para cada relación de Módulos, 1%, 10%, 40%, 70% y 100%.

Otro de los objetivos de realizar ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, en lugar de ensayos de Compresión Isotrópica, es ver la evolución del coeficiente K_0 , durante la prueba de Compresión y como éste se ve afectado por la relación de módulos ($E_{Hidrato}/E_{Arena}$), y el valor del Coeficiente de Fricción propuesto para el hidrato. La evolución del coeficiente K_0 obtenido en las simulaciones de los ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula se observa en las Figuras IV-41, IV-42 y IV-43.

Figura IV-40: Evolución de la relación K_0 , para un coeficiente de fricción entre partículas de arena de 0.025, entre partículas de arena e hidrato 0.025, y entre partículas de hidrato 0.025. a) En la etapa de carga y b) En la etapa de descarga.



a) Etapa de carga



b) Etapa de descarga

Fuente: Elaboración propia.

Como se observa en la Figura IV-41, para un Coeficiente de Fricción entre partículas de 0.025, el Coeficiente K_0 se incrementa levemente a medida que la muestra se comprime, mientras que en la etapa de descarga el Coeficiente K_0 , se incrementa de
manera severa a medida que progresa la descarga. Por su parte la relación de módulos no genera mayor divergencia para valores de 1% y 10%, sin embargo para valores del 40%, se tienen diferencias de hasta 6% en la etapa de descarga, y 12% en la etapa de carga; esto respecto a la línea con relación de módulos del 1%.

Figura IV-41: Evolución de la relación K_0 , para un coeficiente de fricción entre partículas de arena de 0.025, entre partículas de arena e hidrato 0.35, y entre partículas de hidrato 0.35. a) En la etapa de carga y b) En la etapa de descarga





a) Etapa de carga

b) Etapa de descarga

Fuente: Elaboración propia.

En la Figura IV-42, se observa que las tendencias de incremento en el valor del Coeficiente K_0 , para relaciones de módulos del 1% y el 10% ($E_{Hidrato}/E_{Arena}$), se mantienen tanto en la etapa de carga como en la etapa de descarga. Sin embargo para la relación de módulos del 40%, el valor del Coeficiente K_0 disminuye a medida que se carga la muestra (bajo una tendencia no lineal), aunque en general se siguen teniendo menores valores del Coeficiente K_0 , para relaciones de módulos de mayor magnitud.

Por su parte para la relación de módulos del 40% y en la etapa de descarga, se invierte la tendencia observada para la relación de módulos del 1% y el 10%, obteniéndose de esta manera mayores valores del Coeficiente K_0 , a medida que progresa la descarga. Por ejemplo en la etapa de carga la diferencia en el valor del Coeficiente K_0 , para las Relaciones de Módulos de 1% y 10%, en promedio es del 16%, y en la etapa de descarga del 21%.

Figura IV-42: Evolución de la relación K_0 , para un coeficiente de fricción entre partículas de arena de 0.025, entre partículas de arena e hidrato 0.75, y entre partículas de hidrato 0.75. a) En la etapa de carga y b) En la etapa de descarga.



a) Etapa de carga



b) Etapa de descarga

Fuente: Elaboración propia.

El comportamiento global observado en la Figura IV-42, se repite en la Figura IV-43. De igual manera en la Figura IV-43 se puede ver que en la etapa de carga, la diferencia en el valor del Coeficiente K_0 , para las Relaciones de Módulos de 1% y 10%, en promedio es del 25%, y en la etapa de descarga puede llegar al 50%.

Para ver el efecto del Coeficiente de Fricción en el valor del Coeficiente K_0 , tomando por ejemplo una Relación de Módulos fija de 10% y dos Coeficientes de Fricción (0.025 y 0.75). Al final de la etapa de carga se obtiene una diferencia del 15% en el valor del Coeficiente K_0 , para un Coeficiente de Fricción de 0.025 y 0.75. En el caso de la etapa de descarga se obtiene una diferencia del 70% en el valor del Coeficiente K_0 , para un Coeficiente de Fricción de 0.025 y 0.75.

Al revisar las Figuras IV-41, IV-42 y IV-43, se observa que el coeficiente de Fricción entre partículas juega un papel muy importante en el valor del Coeficiente K_0 , que se desarrolla en el proceso de carga o descarga de la muestra; sin embargo, también se observa que la Relación de Módulos es muy importante y que para la muestra estudiada bajo las limitantes de esta investigación, una estimación del Coeficiente K_0 , basada solo en el Ángulo de Fricción de la muestra (ϕ), seria errónea. El estudio de la superficie de fluencia bajo la suposición de validez del modelo CamClay, no pude concluir con el análisis del cambio que pudiere presentarse en el Ángulo de Fricción, con la variación de la relación de módulos ($E_{Hidrato}/E_{Arena}$), y/o la variación del Coeficiente de Fricción asignado a las partículas de hidrato.

Tomando como base la superficie de fluencia propuesta en el modelo CamClay, se tiene que las deformaciones plásticas y elásticas se calculan como sigue,

$$\begin{bmatrix} \delta \varepsilon_p^p \\ \delta \varepsilon_q^p \end{bmatrix} = \frac{(\lambda - k)}{\upsilon p' (M^2 + \eta^2)} \begin{bmatrix} (M^2 - \eta^2) & 2\eta \\ 2\eta & 4\eta^2 / (M^2 - \eta^2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p' \\ \delta q \end{bmatrix}$$
(1)

La expresión (1), es aplicable si la deformación plástica está ocurriendo. Por su parte, la deformación elástica será,

$$\begin{bmatrix} \delta \varepsilon_p^e \\ \delta \varepsilon_q^e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \kappa / \upsilon p' & 0 \\ 0 & 1/3G' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta p' \\ \delta q \end{bmatrix}$$
(2)

Retomado la ecuación (1), vemos que solo resta el análisis de los parámetros (λ) y (κ), obtenidos en los ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, ya que a diferencia del Ángulo de Fricción, estos parámetros presentaron algún grado de variación con el cambio en la relación de módulos ($E_{Hidrato}/E_{Arena}$), y el valor del Coeficiente de Fricción supuesto para las partículas de hidrato.

Por comodidad y con el ánimo de condensar la información obtenida, la misma se presenta mediante graficas donde se relacionan las pendientes de las líneas de Compresión Virgen (λ), y la línea de Recompresión (κ), con la relación de módulos ($E_{Hidrato}/E_{Arena}$), y el valor del Coeficiente de Fricción para el hidrato (ver Figura 4-38). Asimismo se presenta la evolución del volumen específico que la línea de Compresión Virgen (ϑ_{λ}), tiene para una presión de 1 Mpa.

Figura IV-43: Evolución de los parámetros λ y κ con la relación de módulos, **a**) En la etapa de carga y **b**) En la etapa de descarga.







b) Etapa de Descarga

Fuente: Elaboración propia.

En las Figuras IV-44, la línea azul representa la mezcla de arena e hidrato, cuando el Coeficiente de Fricción entre partículas de arena es 0.025, entre partículas de arena e hidrato 0.75 y entre partículas de hidrato 0.75. De igual manera, la línea Roja representa la mezcla de arena e hidrato, cuando el Coeficiente de Fricción entre partículas de arena es 0.025, entre partículas de arena e hidrato 0.35 y entre partículas de arena e hidrato 0.35.

arena e hidrato, cuando el Coeficiente de Fricción entre partículas de arena es 0.025, entre partículas de arena e hidrato 0.025 y entre partículas de hidrato 0.025.

Como se observa en la Figura IV-44, el valor de las pendientes λ y κ , no se ve seriamente afectado por la variación en la Relación de Módulos, ni por el cambio brusco en el Coeficiente de Fricción entre partículas; aunque de manera global, se nota una leve disminución en el valor absoluto de la pendiente de la Línea de Compresión Virgen (λ), y un pequeño incremento en el valor absoluto de la pendiente de la pendiente de la Línea de Recompresión (κ), lo cual es un comportamiento esperado para una muestra que se hace menos deformable a medida que progresa el proceso de carga. Sin embargo, en el caso de muestras reales es posible encontrar que la pendiente de la Línea de Recompresión, disminuye a medida que la muestra se comprime, Ver Figura IV-13.

Figura IV-44: Valor del volumen específico para la línea de compresión virgen anisotrópica a una presión de 1Mpa.



Fuente: Elaboración propia.

En la Figura IV-45, la línea azul representa la mezcla de arena e hidrato, cuando el Coeficiente de Fricción entre partículas de arena es 0.025, entre partículas de arena e hidrato 0.75 y entre partículas de hidrato 0.75. De igual manera la línea roja representa la mezcla de arena e hidrato, cuando el Coeficiente de Fricción entre partículas de arena e arena es 0.025, entre partículas de arena e hidrato 0.35 y entre partículas de arena e hidrato de arena e hidrato 0.35 y entre partículas de hidrato

0.35. En cuanto a la línea Amarilla, esta representa la mezcla de arena e hidrato, cuando el Coeficiente de Fricción entre partículas de arena es 0.025, entre partículas de arena e hidrato 0.025 y entre partículas de hidrato 0.025. Por otra parte la Figura IV-45 permite ver que la adición del hidrato no genera mayor cambio en la posición de las Líneas de Compresión Virgen y la Línea de Recompresión en el plano definido por el Volumen Específico de la muestra y el logaritmo natural de la presión (ν , ln p)

Finalmente uno de los aspectos a resaltar en las Figuras IV-44 y IV-45, es la separación de las líneas Azul, Roja y Amarilla para una Relación de Módulos del 10%, lo cual puede ocurrir cuando el efecto de la fricción entre partículas supera la contribución de la Relación de Módulos en el comportamiento de la mezcla de arena e hidrato.

6. Sobre la variabilidad de los parámetros mecánicos

Wang Dong et al (referencia [8] del Capítulo II), realizaron ensayos de trasmisión de ondas sobre hidratos, encontrando una variación del 15% en valor del Módulo de Young (cambio asociado con la velocidad en la trasmisión de ondas), con el cambio en la temperatura en un rango de variación de 10 grados Celsius.

Al revisar la información presentada a lo largo del Capítulo, se nota que una variación del 15% en el Módulo de Young, para una saturación con hidrato igual o inferior al 27%, no genera cambio alguno en los parámetros que definen el modelo CamClay. Igual razonamiento puede ser aplicado al Coeficiente de Fricción entre partículas de arena e hidrato, así como al Coeficiente de Fricción entre partículas de hidrato.

7. Representación gráfica de la superficie de fluencia

Según lo establecido por el modelo CamClay, la representación gráfica de la superficie de fluencia en el plano p', q, para una muestra que endurece por deformación, está definida por la ecuación (3), con la cual es posible representar cortes de dicha superficie a volúmenes específicos constantes, como los esquematizados mediante el uso de líneas continuas en la Figura II-8.

$$\frac{q}{M(p')} + \left(\frac{\lambda}{\lambda - \kappa}\right) \ln(p') - \left(\frac{\Gamma - \upsilon}{\lambda - \kappa}\right) = 1.0$$
(3)

En la expresión (3),

M es la pendiente de la línea del estado crítico en el plano p', q

 λ es la pendiente de la línea de compresión virgen isotrópica y la pendiente de la línea del estado crítico en el plano $log p', \vartheta$

 κ es la pendiente de la línea de descarga en el plano $log p', \vartheta$

 ϑ es el volumen específico

 Γ es el volumen específico de la muestra cuando el esfuerzo p' es 1 MPa, y el estado de la muestra se encuentra sobre la línea del estado crítico

N aunque este parámetro no aparece en la ecuación (3), el mismo representa el volumen específico de la muestra cuando el esfuerzo p' es 1 MPa, y el estado de la muestra se encuentra en la línea de compresión virgen isotrópica

Al observar la ecuación (3) notamos que a partir de los ensayos realizados no es posible determinar el valor de Γ , pero si contamos con el valor del volumen específico de la muestra para la línea de compresión virgen anisotrópica con deformación radial nula k_0 , y una presión p' de 1 MPa. Es así que al observar la Figura IV-46, la cual se presenta a manera de ejemplo ya que fue obtenida a partir de ensayos de laboratorio sobre muestras de arcilla caolín, notamos que en el plano $log p', \vartheta$, la línea de compresión virgen anisotrópica se ubica aproximadamente en el punto medio entre la línea de compresión virgen isotrópica y la línea del estado crítico, por lo que haciendo uso de dicha Figura, y al suponer que tal característica geométrica podría repetirse en la mezcla de arena e hidrato, es posible estimar un valor aproximado para Γ , así como un valor aproximado para N.

Para desarrollar el proceso de aproximación descrito en el párrafo anterior, primero recordemos que la Línea de Compresión Virgen Isotrópica en el plano $log p', \vartheta$, esta dada por la expresión (4),

$$\upsilon = N - \lambda \ln(p') \tag{4}$$

Ahora imaginemos un proceso de consolidación isotrópica que comprime una muestra hasta llevarla a la línea de compresión virgen isotrópica donde el volumen específico es ϑ_0 y el esfuerzo efectivo normal promedio es p'_c , por lo que tendremos lo siguiente,

$$\vartheta_0 = N - \lambda \ln(p'_c) \tag{5}$$

Al remplazar (5) en (3), y tener en cuenta que una vez se ha alcanzado el volumen especifico ϑ_0 , bajo el esfuerzo efectivo normal promedio p'_c , el valor del esfuerzo cortante *q* es cero, se tendrá que,

$$\frac{(0)}{M(p_{c}^{'})} + \left(\frac{\lambda}{\lambda - \kappa}\right) \ln(p_{c}^{'}) - \left\{\frac{\Gamma - \left[N - \lambda \ln(p_{c}^{'})\right]}{\lambda - \kappa}\right\} = 1.0$$

$$N - \Gamma = \lambda - \kappa$$
(6)

La expresión (6) permite encontrar la diferencia $N - \Gamma$, la cual se esquematiza en la Figura IV-46.

Figura IV-45: Ejemplo de la Línea de Compresión Virgen Isotrópica, la Línea de Compresión Virgen Anisotrópica y la Línea del Estado Crítico en el plano $\log p', \vartheta$



Fuente: La imagen fue tomada de la referencia [12] del Capítulo II, y se obtuvo al realizar ensayos sobre muestras de caolín.

Los valores de λ y κ , obtenidos de las simulaciones de ensayos de compresión unidimensional con deformación radial, son nuevamente presentados en la Tabla IV-6, y a partir de estos y con la ayuda de la ecuación (6), se calcula el valor aproximado de la diferencia entre $N - \Gamma$, cuyos resultados se presentan en la Tabla IV-7. Por otra parte el volumen específico obtenido de las simulaciones citadas, a una presión de 1 Mpa, se presenta nuevamente en la Tabla IV-8.

Tabla IV-6: Valores de λ y κ obtenidos en simulaciones de ensayos de compresión unidimensional con deformación radial nula.

	Hidrato (μ=0,75) Arena (μ=0,025)		Hidrato	(µ=0,35)	Hidrato (μ=0,025) Arena (μ=0,025)		
			Arena (μ=0,025)			
Relación de Módulos	2	K	2	K	2	K	
hidrato/Arena	Л	Λ	Л	λ	λ	r	
1%	0,140	0,092	0,139	0,089	0,138	0,084	
10%	0,153	0,103	0,147	0,096	0,132	0,081	
40%	0,133	0,095	0,130	0,101	0,129	0,103	
70%	0,129	0,108	0,131	0,105	0,132	0,097	
100%	0,131	0,112	0,132	0,108	0,133	0,098	

Fuente: Elaboración propia.

Tabla IV-7: Valores de $N - \Gamma$ obtenidos en simulaciones de ensayos de compresión unidimensional con deformación radial nula.

	Hidrato (µ=0,75)	Hidrato (µ=0,35)	Hidrato (µ=0,025)		
	Arena (µ=0,025)	Arena (µ=0,025)	Arena (µ=0,025)		
Relación de Módulos	$N - \Gamma$	$N - \Gamma$	$N - \Gamma$		
hidrato/Arena	1 1	11 1	10 1		
1%	0,047	0,050	0,053		
10%	0,049	0,050	0,051		
40%	0,037	0,029	0,026		
70%	0,021	0,025	0,035		
100%	0,019	0,024	0,035		

Fuente: Elaboración propia.

Tabla IV-8: V	/alores d	le volumen	específico	θ _λ ,	sobre	la	línea	de	compresión	virgen
anisotrópica p	bara una	presión de '	1 Mpa.							

	Hidrato (µ=0,75)	Hidrato (µ=0,35)	Hidrato (µ=0,025)	
	Arena (µ=0,025)	Arena (µ=0,025)	Arena (µ=0,025)	
Relación de Módulos	.0	-0	-0	
hidrato/Arena	v_{λ}	v_{λ}	v_{λ}	
1%	1,840	1,853	1,856	
10%	1,820	1,910	1,945	
40%	1,894	1,887	1,882	
70%	1,900	1,905	1,910	
100%	1,924	1,928	1,927	

Fuente: Elaboración propia.

Bajo la suposición de que la línea de compresión virgen anisotrópica simulada en la presente investigación, se ubica aproximadamente en el punto medio entre la línea de compresión virgen isotrópica y la línea del estado crítico, el valor aproximado para Γ , y para N será el presentado en la Tabla IV-9, y se calculara como sigue,

$$N = \vartheta_{\lambda} + \frac{N - \Gamma}{2} \tag{7}$$

$$\Gamma = \vartheta_{\lambda} - \frac{N - \Gamma}{2} \tag{8}$$

Tabla IV-9: Valores de $N - \Gamma$ estimados a partir de la Tabla IV-8 y las ecuaciones 7 y 8.

	Hidrato (µ=0,75)		Hidrato	(µ=0,35)	Hidrato (µ=0,025)		
	Arena (μ=0,025)		Arena (μ=0,025)	Arena (μ=0,025)		
Relación de Módulos	N	Г	Ν	Г	Ν	Г	
hidrato/Arena	IN			I			
1%	1,864	1,817	1,878	1,828	1,883	1,829	
10%	1,845	1,795	1,936	1,885	1,971	1,920	
40%	1,912	1,875	1,902	1,873	1,895	1,869	
70%	1,910	1,889	1,918	1,892	1,928	1,892	
100%	1,933	1,914	1,940	1,916	1,944	1,909	

Fuente: Elaboración propia.

Por otra parte para un suelo que ablanda por deformación, y en el plano p', q, se tiene la siguiente ecuación para la superficie de fluencia,

$$\frac{q}{Mp'} - \left(\frac{M-H}{Hp'}\right) exp\left(\frac{\Gamma-\vartheta}{\lambda}\right) = 1.0$$
(9)

Recordando que el ángulo de fricción es 25 grados, podremos calcular el valor de M como sigue,

$$M = \frac{6sen(\phi_{CS})}{3 - sen(\phi_{CS})}$$

$$M = \frac{6sen(25)}{3 - sen(25)} = 0.983$$
(10)

En el plano p', q, comúnmente se acepta que la superficie de tracción para un volumen específico dado, es una línea recta que intercepta el origen del plano coordenado y

tiene una pendiente 3:1. Por otra parte la variable H es la pendiente de la línea que representa a la superficie de Hvorslev en el plano p',q, pero como no se dispone de los ensayos físicos, o de simulaciones numéricas que permitan medir dicha pendiente, la misma será calibrada garantizando que la línea que representa la superficie de Hvorslev, coincida geométricamente con la superficie de fluencia definida por el modelo CamClay, en puntos cercanos a la línea del estado crítico y para volúmenes específicos de 1.45, 1.55, 1.65 y 1.75.

De esta manera los cortes de la superficie de fluencia obtenidos a partir de las simulaciones numéricas usando el DEM, se presentan en las Figuras IV-47, IV-48, IV-49 y IV-50. Para la arena sin hidrato la superficie de fluencia se calcula con base en los valores de λ , κ y ϑ_{λ} obtenidos en el numeral 4 del presente capítulo, y las ecuaciones 7 y 8, con lo cual se obtiene un valor de 1.9515 para Γ , y 2.0525 para N, sin embargo se recuerda que la muestra de arena sin hidrato tiene 900 partículas más que la mezcla de arena e hidrato, lo cual representa aproximadamente un 5% de diferencia en el número de partículas de arena, por lo que las dos muestras no son comparables.

Como se observa en la Figura IV-47, cuando la relación de módulos es 1% y el coeficiente de fricción asignado a las partículas de hidrato es el mismo que el coeficiente asignado al contacto entre partículas de arena, la superficie de fluencia para la mezcla de arena e hidrato incrementa su tamaño, respecto al caso en el cual el coeficiente de fricción asignado al hidrato es mucho mayor que el coeficiente asignado entre partículas de arena. Sin embargo a medida que el valor de q se incrementa, la diferencia entre los dos cortes de la superficie de fluencia parece disminuir.

Cuando el valor de q es bajo las tendencias observadas en la Figura IV-47 para una relación de módulos del 1%, aun se pueden observar en la Figura IV-48, donde se muestran los cortes de la superficie de fluencia para una relación de módulos del 100%. Sin embargo cuando el valor de q es alto, el corte de la superficie de fluencia para la muestra cuyas partículas de hidrato tienen un coeficiente de fricción mayor al de las partículas de arena, exhibe una mayor resistencia respecto al corte de la superficie de fluencia de fluencia de hidrato tienen un coeficiente de fluencia de las partículas de arena, exhibe una mayor resistencia respecto al corte de la superficie de fluencia de la superficie de fluencia de la superficie de fluencia de hidrato tienen un coeficiente de fricción igual al del contacto entre partículas de arena.

Figura IV-46: Influencia del coeficiente de fricción asignado al hidrato, en los cortes de la superficie de fluencia para una mezcla de arena e hidrato, cuatro volúmenes específicos y una relación de módulos del 1%.



Fuente: Elaboración propia.

Figura IV-47: Influencia del coeficiente de fricción asignado al hidrato, en los cortes de la superficie de fluencia para una mezcla de arena e hidrato, cuatro volúmenes específicos y una relación de módulos del 100%.



Fuente: Elaboración propia.

Figura IV-48: Influencia de la relación de módulos, en los cortes de la superficie de fluencia para una mezcla de arena e hidrato, cuatro volúmenes específicos y un coeficiente de fricción asignado al hidrato de 0.75.



Fuente: Elaboración propia.

Figura IV-49: Influencia de la relación de módulos, en los cortes de la superficie de fluencia para una mezcla de arena e hidrato, cuatro volúmenes específicos y un coeficiente de fricción asignado al hidrato de 0.025.



Fuente: Elaboración propia.

Al revisar la Figura IV-48, el comportamiento de los cortes de la superficie de fluencia para un mismo volumen específico, podría explicarse al imaginar el movimiento de las partículas individuales durante un proceso de carga. En este sentido cuando se impone sobre el medio granular una carga de corte, el movimiento de las partículas podría darse por deslizamiento entre las mismas, para lo cual se requiere aplicar mayor energía en comparación con el caso donde las partículas ruedan entre sí.

Al imaginar la mezcla de arena e hidrato aquí estudiada, se podría aceptar que la distribución de fricción en la misma es uniforme a nivel global, sin embargo a nivel de partícula las diferencias en los coeficientes de fricción podrían facilitar el rodamiento entre partículas, lo cual también podría acentuarse si la relación de módulos es baja. Por otra parte el incremento en la relación de módulos trae consigo un incremento en el tamaño de la superficie de fluencia como se puede apreciar en las Figuras IV-48 y IV-49, lo cual es de esperase ya que la muestra se densifica.

8. Bibliografía

[1]. J.C. Santamarina, S. Dai, M. Terzariol, J. Jang, W.F. Waite, W.J. Winters, J. Nagao, J. Yoneda, Y. Konno, T. Fujii and K. Suzuki (2015), Hydro-bio-geomechanical properties of hydrate-bearing sediments from Nankai Trough, Marine and Petroleum Geology, http://dx.doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2015.02.033.

[2]. Eulalio Juárez Badillo y Alfonzo Rico Rodríguez (2001). Mecánica de Suelos, Vigesimocuarta reimpresión de la Tercera Edición, Editorial Limusa S.A. ISBN 968-18-0069-9.

[3]. Kloss, C., Goniva, C., Hager, A., Amberger, S. and Pirker, S. (2012) Models, algorithms and validation for opensource DEM and CFD-DEM, Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 12, Nos. 2/3, pp.140–152. doi: 10.1504/PCFD.2012.047457.

[4]. Laura A. Stern, Thomas D. Lorenson and John C. Pinkston (2011), Gas hydrate characterization and grain-scale imaging of recovered cores from the Mount Elbert Gas Hydrate Stratigraphic Test Well, Alaska North Slope, Marine and Petroleum Geology 28, Pag 394–403. doi:10.1016/j.marpetgeo.2009.08.003.

V. Conclusiones y Recomendaciones

1. Conclusiones

- Aceptando las simplificaciones y demás suposiciones realizadas en la presente investigación, se prueba que la hipótesis de trabajo es parcialmente válida, ya que esta asegura que en una mezcla de arena e hidrato, cualquier variación en las propiedades mecánicas del hidrato, genera cambios visibles en la superficie de fluencia de la mezcla, sin embargo solo la variación en la relación de módulos y el coeficiente de fricción generan cambios en la superficie mencionada, pero la variación en el coeficiente de restitución y la relación de poisson no generan cambios visibles, lo cual se hace notorio en las simulaciones de los ensayos de Corte Directo y Compresión Unidimensional.
- Cuando en la aplicación del Método de los Elementos Discretos se usan partículas esféricas, no es recomendable realizar la simulación numérica del comportamiento mecánico de sedimentos con baja densidad de partículas. Esto se debe a la dificultad que representa el construir muestras de baja densidad con partículas esféricas, por lo que usualmente al no lograse las densidades deseadas, es necesario manipular los parámetros de contacto, para de esta manera poder representar muestras reales poco densas con muestras numéricas muy densas, lo cual representa una debilidad de esta versión del método numérico.
- Cuando la densidad del sedimento no es reproducida con un buen grado de aproximación en el modelo numérico, se hace necesario usar coeficientes de fricción artificialmente bajos, lo cual impacta de manera directa la calidad del modelo. Por otra parte el usar coeficientes de fricción bajos y muestras numéricas muy densas para representar el comportamiento de mezclas de baja densidad, genera que las simulaciones numéricas de los ensayos de Compresión Unidimensional, produzcan valores muy altos para el Coeficiente de Compresión y el Coeficiente de Recompresión.
- Teniendo en cuenta que la distribución granulométrica de las muestras, su densidad, su construcción, y el modelo de contacto empleado por algunos de

los autores citados en el Capítulo III, es similar a lo usado en la presente investigación, se puede concluir que la diferencia existente entre el valor numérico de las variables del modelo de contacto reportadas por las referencias bibliográficas, y los valores usados en la presente investigación, en parte podría tener origen en las condiciones de frontera de los ensayos simulados en cada caso, ya que tanto los resultados arrojados por PCF y LIGGGHTS presentan una baja discrepancia según lo han comprobado los desarrolladores de LIGGGHTS.

- Usualmente las pruebas de Corte Directo se realizan manteniendo un esfuerzo normal aproximadamente constante sobre el plano de corte inducido, sin embargo al realizar pruebas de Corte Directo donde el esfuerzo normal varía, se obtiene la misma relación ente el Ángulo de Fricción movilizado y el desplazamiento de la caja de corte para cada metodología de ensayo, por lo que en este caso no se justifica asignar recursos computacionales para garantizar un esfuerzo normal constante sobre el plano de corte.
- Para las muestras y ensayos simulados, el Ángulo de Fricción movilizado con el desplazamiento de la caja de corte, principalmente se ve afectado por el Coeficiente de Fricción entre partículas, sin embargo las demás variables que hacen parte del modelo de contacto usado en las simulaciones numéricas, Módulo de Young, Relación de Poisson y Coeficiente de Restitución, no presentan influencia visible en la evolución de esta variable.
- En el ensayo de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, la ubicación de la curva definida por la Relación de Vacíos de la muestra y el esfuerzo normal aplicado a la misma, a lo largo del eje de esfuerzos, es controlada por el Modulo de Young. Por otra parte el coeficiente de fricción controla la pendiente de esta curva, el coeficiente de restitución no presenta influencia en la misma, y la relación de poisson es poco significativa.
- A partir de la simulación de ensayos de Compresión Unidimensional con deformación radial nula, fue posible calcular la relación K_0 , entendida como el cociente entre el esfuerzo lateral y esfuerzo axial (σ_r/σ_a) . De esta manera se encontró que dicha relación de esfuerzos presenta una gran variación, la cual

es función del coeficiente de fricción entre partículas y la relación de módulos entre las mismas ($E_{Hidrato}/E_{Arena}$). Es así que cuando la relación de módulos es mayor al 40%, la evolución del coeficiente K_0 es contralada por el coeficiente de fricción, pero cuando la relación de módulos es inferior al 40%, es este último parámetro quien controla la evolución del coeficiente K_0 .

2. Recomendaciones

- Para próximas investigaciones, se recomienda implementar modelos numéricos capaces de incluir elementos discretos con formas irregulares. Dichos modelos deben ser capaces de simular la interacción de cada elemento discreto con el fluido intersticial que exista. De igual manera se recomienda modelar ensayos Triaxial, pues la información experimental publicada para estos ensayos, es mayor que la existente para otro tipo de ensayos.
- Una vez implementada la recomendación anterior, se recomida estudiar el cambio de fase del metano hidratado, en la respuesta mecánica de mezclas de sedimentos e hidratos.
- Se recomienda realizar el análisis desarrollado en el Capítulo IV, para saturaciones con hidrato mayores al 27%; esto en un rango lo suficientemente amplio para establecer tendencias de comportamiento.