

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE
PERNAMBUCO**



Maria Helena Melo Ferrer de Moraes

**Modelagem de Fenômenos Osmóticos de Fluxo e
Deformação em Solos Argilosos**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da UFPE como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Civil - Engenharia Geotécnica

Orientador: Leonardo José do Nascimento Guimarães

Recife – Dezembro de 2006

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE **F**EDERAL DE
PERNAMBUCO



Maria Helena Melo Ferrer de Moraes

**Modelagem de Fenômenos Osmóticos de Fluxo e
Deformação em Solos Argilosos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil - Engenharia Geotécnica

Orientador: Leonardo José do Nascimento Guimarães

M827m **Morais, Maria Helena Melo Ferrer de**

Modelagem de fenômenos osmóticos de fluxo e deformação em solos argilosos / Maria Helena Melo Ferrer de Moraes. – Recife: O Autor, 2006.

xiii, 90 f.; il., gráfs., tabs. +cd-rom.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CTG. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil, 2006.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Civil. 2. Solos Argilosos. 3. Modelagem de Fenômenos Osmóticos. I. Título.

624 CDD (22.ed.)

UFPE/BCTG/2007-53



Maria Helena Melo Ferrer de Moraes

**Modelagem de Fenômenos Osmóticos de Fluxo e
Deformação em Solos Argilosos**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da UFPE como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Civil - Engenharia Geotécnica

Leonardo José do Nascimento Guimarães, D.Ing.
Orientador

Márcio Arab Murad, Ph.D.
Examinador Externo

Ivaldo Dário da Silva Pontes Filho, D.Sc.
Examinador Interno

Lícia Mouta da Costa, D.Sc.
Examinador Interno

A Luis Gustavo,
meu esposo.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Leonardo José do Nascimento Guimarães pela orientação, dedicação, conhecimentos transmitidos e confiança ao propor-me um tema ainda novo dentro do grupo de pesquisa.

Ao professor Ivaldo Dário da Silva Pontes Filho pela oportunidade de inserir-me no grupo de geomecânica ainda durante a graduação, pelo incentivo e carinho.

À professora Lícia Mouta Costa, sempre disposta a ajudar, pelo ensinamento e apoio durante minha iniciação científica, pelas primeiras instruções sobre o GID e o CODE_BRIGHT.

Aos professores Washington Amorim e Anísio Brasileiro por perceberem minha aptidão para a área de métodos numéricos e apresentar-me ao professor Ivaldo.

Aos colegas do Laboratório de Métodos Computacionais e Geomecânicas (LMCG), pelos momentos de descontração, incentivo, apoio e esclarecimento constante de dúvidas. Em especial, a Ramon pela amizade e pelas pesquisas em conjunto durante a graduação, a Igor pelo bom humor e palavras estimulantes, a Roubier sempre disponíveis a dirimir dúvidas.

A Manoela e Bruno, também colegas do LMCG, pela amizade, companheirismo, sugestões e pelas palavras de incentivos nos momentos difíceis.

Às funcionárias da secretária da pós-graduação Dona Laudenice e Andréa pela presteza na solução dos problemas burocráticos.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

Aos amigos da graduação Alice, Aline, Diego, Izabela, que apesar da distância estão torcendo pelo meu sucesso e vibrando com mais este título.

Às amigas Maria Crystianne e Alinne pelo companheirismo depois de tantos anos de convivência, por estarem sempre presentes quando preciso, pelo carinho e apoio irrestrito.

Aos meus irmãos, Débora, Bárbara e Eduardo, que sempre estiveram do meu lado, pela infância maravilhosa que tivemos e, agora que estou longe, por esta saudade gostosa que sinto.

Ao meu pai, José Guelfer, pelo amor, dedicação, pelo exemplo de honestidade, ética e dignidade, pelo esforço de proporcionar-me uma boa formação moral e intelectual. À minha mãe, Cláudia, fonte inesgotável de amor e carinho, pela amizade, dedicação, cumplicidade e companheirismo. Vocês sempre serão meu porto seguro.

Ao meu esposo, Luis Gustavo, pela ajuda durante a realização desse trabalho, pelas sugestões e críticas. Pelo companheirismo, pela paciência, por todo amor e dedicação recebidos diariamente, sem os quais certamente não concluiria essa pesquisa. Essa dissertação é dedicada a ele.

A todos que contribuíram de alguma forma para a realização desse trabalho e que injustamente não foram citados.

RESUMO

Modelagem de Fenômenos Osmóticos de Fluxo e Deformação em Solos Argilosos

Orientador: Leonardo José do Nascimento Guimarães, D. Sc.

Palavras-chave: Fluxo Osmótico; Modelagem numérica; Elementos Finitos.

Número de páginas: 90

Os solos argilosos quimicamente ativos, quando expostos a contaminantes químicos tais como soluções salinas, apresentam alterações no comportamento hidráulico e mecânico cujas explicações fogem aos conceitos da mecânica dos solos tradicional. Esta dissertação visa modelar a influência dos efeitos osmóticos no comportamento dos solos argilosos, buscando a compreensão dos fenômenos que os envolvem através de uma formulação matemática que acopla os comportamentos hidráulico, mecânico e geoquímico do solo. De maneira mais específica, a pesquisa tem como objetivo calibrar os parâmetros de acoplamento necessários à simulação numérica via elementos finitos. São eles: a eficiência osmótica (ω), a constante cinética (β) e o termo de razão entre o coeficiente geoquímico de variação volumétrica e o coeficiente mecânico de variação volumétrica (ζ). Os ensaios realizados por Santamarina & Fam (1995) e Fam & Santamarina (1996) foram utilizados como base de referência para a validação do modelo proposto. Diversos cenários com distintos níveis de acoplamento entre os fenômenos foram testados no simulador a fim de se alcançar a reprodução satisfatória dos resultados experimentais. O código de elementos finitos usado foi o CODE_BRIGTH, desenvolvido por Olivella et al. (1995) e complementado por Guimarães (2002). Os resultados da simulação indicaram que o modelo proposto reproduziu de maneira bastante coerente os problemas analisados, com um bom ajuste entre as curvas teóricas e experimentais. Verificou-se a sensibilidade das respostas do problema à variação dos parâmetros de acoplamento. O modelo foi capaz de identificar claramente os dois tipos de adensamento químico (adensamento osmótico e o adensamento osmoticamente induzido) ocorrendo simultaneamente num mesmo ensaio.

ABSTRACT

Modeling of osmotic flow and deformation phenomena of clay soils

Advisors: Leonardo José do Nascimento Guimarães

Keywords: Osmotic Stream; Numerical Modeling; Finite Element.

Chemically active clay soils, when subject to chemical contaminants such as saline solutions, present changes in mechanical and hydraulic behavior, which can not be explained by traditional soil mechanics concepts. This dissertation aims to model the influence of osmotic effects in the behavior of clay soils, trying to understand the phenomena involved through a mathematical formulation which couples the mechanical, hydraulic and geochemical soil behaviors. In a more specific way, this research purpose is to calibrate coupling parameters needed for numerical simulation by finite element method. Which are: osmotic efficiency (ω), kinetic constant (β) and the ratio between the geochemical and mechanical volumetric change coefficients (ζ). The tests carried out by Santamarina & Fam (1995) and Fam & Santamarina (1996) were used as reference to validate the proposed model. Several examples with different coupling levels were tested in the simulator in order to achieve a satisfactory reproduction of experimental results. The finite element code used was CODE_BRIGTH, developed by Olivella et al. (1995) and complemented by Guimarães (2002). The simulation results pointed out that the proposed model reproduced in a very coherent way the analyzed problems, with a good adjust between the theoretical and experimental curves. The sensibility of coupling parameters variation was also verified. The model was able to identify clearly to types of chemical consolidation (osmotic consolidation and osmotically induced consolidation) occurring simultaneously in a same test.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 2.1 – Meio poroso de dupla estrutura. (a) representação esquemática da macroestrutura. (b) representação esquemática da microestrutura. (c) diagramas de fases. (10)
- Figura 2.2 – Representação esquemática da estrutura laminar da argila. (a) visão microscópica de uma montmorilonita sódica estratificada e seca (Sociedade Brasileira de Microscopia e Microanálise). (b) estrutura laminar de uma montmorilonita. (c) rede cristalina octaédrica. (d) rede cristalina tetraédrica. (e) unidade cristalográfica octaédrica. (f) unidade cristalográfica tetraédrica (Mitchell, 1993). (12)
- Figura 2.3 – Tetraedro de silício camada estrutural de unidades tetraédricas (Mitchell, 1993). (12)
- Figura 2.4 – Unidade octaédrica e camada estrutural de unidades octaédricas (Mitchell, 1993). (12)
- Figura 2.5 – Diagramas das estruturas dos minerais argílicos. (a) caulinita, (b) esmectita, (c) esmectita-ilita (Mitchell, 1993). (13)
- Figura 2.6 – Dupla camada difusa: superfície negativa e carga elétrica distribuída (Mitchell, 1993). (15)
- Figura 2.7 – Estruturas da dupla camada difusa – potencial (Ψ) versus distância da camada (x). (a) dupla camada de Helmholtz, (b) dupla camada difusa de Gouy-Chapman, (c) dupla camada de Stern e (d) camada totalmente difusa. (18)
- Figura 2.8 – Tipos de fluxos diretos através da massa do solo (Mitchell, 1991). (22)

- Figura 2.9 – Fluxo osmótico de água através de uma membrana semipermeável perfeita. (26)
- Figura 2.10 – Eficiência osmótica versus $bc^{1/2}$, onde c é a concentração monovalente em normalidade, e $2b$ é o espaço efetivo entre as superfícies das partículas (Bresler, 1973) *apud* (Mitchell, 1991). (32)
- Figura 2.11 – Eficiência osmótica versus porosidade (a) e concentração (b) (Guimarães, 2002). (33)
- Figura 3.1 – Comparação dos efeitos mecânicos e osmóticos em argilas expansivas expostas à solução salina. (a) – processo de mudança de volume. (b) – processo de umedecimento Di Maio (1996). (51)
- Figura 3.2 – Acoplamento fraco no CODE_BRIGTH (Guimarães, 2002). (54)
- Figura 3.3 – Acoplamento forte no CODE_BRIGTH (Guimarães, 2002). (55)
- Figura 4.1 – Esquema da célula edométrica modificada (Santamarina & Fam, 1995). (60)
- Figura 4.2 – Deformação vertical medida e calculada na amostra submetida a uma solução à 4.0M de KCl (64)
- Figura 4.3 – Pressão de poros medida e calculada na camada inferior da amostra. (65)
- Figura 4.4 – Resultados numéricos do problema geoquímico – ensaio edométrico modificado. (a) difusão da concentração de K^+ . (b) difusão da concentração de Cl^- . (66)
- Figura 4.5 – Resultados numéricos do problema hidráulico – ensaio edométrico modificado. (a) evolução da pressão de poros. (b) fluxo de líquido através da amostra. (67)
- Figura 4.6 – Resultados numéricos do problema mecânico – ensaio edométrico modificado. (a) variação da porosidade. (b) deformação vertical da amostra. (68)
- Figura 4.7 – Sucção osmótica microestrutural e macroestrutural calculada numericamente. (69)

- Figura 4.8 – Pressão de poros medida e calculada na face inferior da amostra sem considerar o fluxo osmótico. (70)
- Figura 4.9 – Esquema da célula isotrópica (Santamarina & Fam, 1995). (72)
- Figura 4.10 – Resultados experimentais: deformação vertical e volume expelido para a amostra de bentonita (Santamarina & Fam, 1995). (72)
- Figura 4.11– Resultados numéricos: deformação vertical e volume expelido para a amostra de bentonita. (73)
- Figura 4.12 – Resultados numéricos do problema geoquímico – ensaio de compressão isotrópica. (a) difusão da concentração de K^+ . (b) difusão da concentração de Cl^- . (74)
- Figura 4.13 – Resultados numéricos do problema hidráulico – ensaio de compressão isotrópica. (a) evolução da pressão de poros. (b) fluxo de líquido através da amostra. (75)
- Figura 4.14 – Resultados numéricos do problema mecânico – ensaio de compressão isotrópica. (a) variação da porosidade. (b) deformação vertical da amostra. (76)
- Figura 4.15 – Análise de sensibilidade da deformação vertical da amostra aos parâmetros ζ , β , ω e k . (78)
- Figura 4.16 – Análise de sensibilidade da pressão de poros máxima da amostra aos parâmetros ζ , β , ω e k . (79)
- Figura 4.17 – Sensibilidade da pressão de poros a variações no parâmetro ζ . (79)
- Figura 4.18 – Análise de sensibilidade da pressão de poros mínima da amostra aos parâmetros ζ , β , ω e k . (80)
- Figura 4.19 – Sensibilidade da pressão de poros a variações no parâmetro da constante cinética (β). (81)
- Figura 4.20 – Sensibilidade da pressão de poros a variações no parâmetro de eficiência osmótica (ω). (81)

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Fluxos diretos e acoplados (Mitchell, 1993).	(24)
Tabela 3.1 – Fluxos diretos e acoplados considerados na presente formulação.	(36)
Tabela 3.2 – Modelos para as tensões efetivas (Fam & Santamarina, 1996).	(46)
Tabela 4.1 – Caracterização da bentonita testada por Santamarina & Fam.	(61)
Tabela 4.2 – Parâmetros utilizados na simulação numérica.	(63)
Tabela 4.3 – Valores de referência dos parâmetros adotados para análise de sensibilidade.	(77)

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	(1)
1.1 DESCRIÇÃO E MOTIVAÇÃO DO PROBLEMA	(1)
1.2 OBJETIVOS	(3)
1.2.1 Objetivo Geral	(3)
1.2.1 Objetivo Específico	(4)
1.3 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	(5)
2. FENÔMENOS OSMÓTICOS EM ARGILAS SATURADAS	(7)
2.1 INTRODUÇÃO	(7)
2.2 NÍVEIS ESTRUTURAIS DO MINERAL DE ARGILA	(9)
2.3 MINERALOGIA DAS ARGILAS E DUPLA CAMADA DIFUSA	(11)
2.3.1 Teoria da Dupla Camada Difusa	(14)
2.4 TIPOS DE FLUXOS ATRAVÉS DO SOLO	(20)
2.4.1 Fluxos Diretos	(21)
2.4.2 Fluxos Acoplados	(23)
2.5 MECANISMO DE ADENSAMENTO QUÍMICO	(27)
2.5.1 Adensamento Osmótico	(29)
2.5.2 Adensamento Osmoticamente Induzido	(30)
3. FORMULAÇÃO MATEMÁTICA	(35)
3.1 INTRODUÇÃO	(35)

3.2	FORMULAÇÃO HMC COM FLUXOS OSMÓTICOS E ACOPLAMENTO QUÍMICO- MECÂNICO	(36)
3.2.1	Problema Hidro-mecânico Sem a Consideração do Fluxo Osmótico de Água	(37)
3.2.2	Problema de Transporte de Solutos Sem a Consideração de Ultrafiltração	(38)
3.2.3	Fluxos Osmóticos nas Equações de Fluxo de Líquido e Transporte de Solutos	(39)
3.3	MODELO CONSTITUTIVO MECÂNICO	(44)
3.3.1	O Conceito de Tensão Efetiva Verdadeira	(45)
3.3.2	Modelo Elasto-químico Adotado	(47)
3.3.3	Lei Cinética para a Variável de Estado Química	(49)
3.4	ESQUEMA NUMÉRICO DOS PROBLEMAS DE ACOPLAMENTO TERMO-HIDRO-MECÂNICO E QUÍMICO	(52)
4.	ANÁLISE DOS RESULTADOS	(57)
4.1	INTRODUÇÃO	(57)
4.2	ENSAIOS DE SANTAMARINA & FAM	(58)
4.2.1	Descrição do Ensaio Edométrico Modificado de Santamarina & Fam	(60)
4.2.2	Caracterização da Bentonita Utilizada por Santamarina & Fam	(61)
4.2.3	Simulação Numérica do Ensaio Edométrico Modificado	(61)
4.2.4	Resultados Numéricos do Ensaio Edométrico Modificado	(63)
4.2.5	Simulação Numérica do Ensaio Edométrico Sem a Consideração de Fluxos Osmóticos	(69)
4.2.6	Simulação Numérica do Ensaio de Compressão Isotrópica	(71)
4.3	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS PARÂMETROS DO MODELO	(76)

5. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS	(83)
5.1 CONCLUSÕES	(83)
5.2 SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS	(86)
6. REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA	(87)

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 DESCRIÇÃO E MOTIVAÇÃO DO PROBLEMA

A recente evolução das técnicas de ensaios de laboratório e campo, permitindo num mesmo experimento a medição simultânea de variáveis de diferentes naturezas (térmicas, hidráulicas, mecânicas e químicas), aliada ao avanço dos Métodos Computacionais em Engenharia, vem permitindo a incorporação de novas ferramentas de trabalho na elaboração dos projetos de engenharia, introduzindo uma nova metodologia onde o comportamento das obras (ou sistemas de engenharia) é reproduzido de maneira bem mais próxima da realidade. A grande novidade, do ponto de vista de formulação matemática, é que estas novas ferramentas são integradoras de problemas (abordagem multi-física), permitindo numa só análise reproduzir o comportamento de um sistema complexo. Através de acoplamentos de fenômenos que antes eram tratados de forma separada, seja por limitações na realização dos experimentos ou por dificuldades em formular matematicamente (ou implementar numericamente) o problema.

No caso da geotecnia ambiental, seu recente surgimento (ou reconhecimento) ampliou notavelmente o alcance e as aplicações dos problemas geotécnicos, introduzindo novos aspectos que não eram característicos da engenharia geotécnica tradicional. O projeto de barreiras argilosas em aterros controlados é uma destas aplicações onde os fenômenos hidráulicos e químicos (transporte de contaminantes) em meios totalmente ou parcialmente saturados são variáveis importantes.

Na engenharia de petróleo, um exemplo são as pesquisas sobre a perfuração de poços em folhelhos, uma das principais rochas geradoras de petróleo, que apontam o fluxo osmótico de

água como elemento que influi na estabilidade mecânica do poço recém perfurado. Neste caso, o fluxo osmótico originado da diferença de salinidade entre o fluido de perfuração e a água dos poros da rocha contribui para acelerar a dissipação da pressão dos poros gerada inicialmente no processo de perfuração (Frydman & Fontoura, 2001).

Estas novas aplicações, relacionadas principalmente com os efeitos das ações químicas sobre o comportamento hidro-mecânico dos solos argilosos, requerem novas técnicas experimentais, assim como a ampliação dos marcos conceituais dos modelos constitutivos. Esta ampliação pode ser realizada incorporando novas variáveis de estado para o comportamento dos solos argilosos quimicamente ativos, explorando novos fenômenos de fluxo e transporte. Dentro dessa abordagem, esta dissertação visa estudar os efeitos dos fenômenos osmóticos nos solos argilosos saturados.

As argilas são constituídas de minerais cristalinos bastante pequenos, que se caracterizam por possuírem uma grande superfície específica e por apresentarem carregamento negativo na superfície de suas partículas (Lambe e Whitman, 1969). Devido a isto, o comportamento de um solo argiloso é fortemente influenciado pelas forças e fenômenos de superfícies. Assim, partículas de argila em solução atraem íons de carga positivas (cátions) e repelem os ânions, originando a dupla camada difusa.

A consideração da teoria da dupla camada difusa é essencial para a previsão e a compreensão do comportamento mecânico dos solos argilosos empregados na engenharia geotécnica. Mudanças na espessura da dupla camada decorrentes, por exemplo, da alteração da composição química da água dos poros, causam variações de volume em solos argilosos quimicamente ativos (Di Maio, 1996).

Desta maneira, os solos argilosos são susceptíveis a exposições de fatores como gradiente de potencial elétrico, térmico, hidráulico e químico. Observa-se que a ação das forças eletrostáticas de atração e de repulsão em conjunto com esses gradientes pode restringir ou facilitar o movimento das espécies envolvidas, ocasionando fluxos de diversas naturezas e origens. O entendimento dos fluxos acoplados é essencial para compreensão do comportamento mecânico de solos argilosos quimicamente ativos.

Quando um solo argiloso está exposto a soluções salinas concentradas, dois mecanismos de adensamento químico são possíveis: o adensamento osmótico e o adensamento osmoticamente induzido (Babour & Fredlund, 1989). O primeiro, está relacionado com a interação físico-química das partículas. Observa-se que um aumento na concentração dos íons resulta na retração da dupla camada e conseqüente tendência de diminuição de volume do solo. Por outro lado, o adensamento osmoticamente induzido, é devido ao fluxo de água que sai da amostra pela ação de gradiente osmótico, gerando poro pressões negativas e aumentando conseqüentemente a tensão efetiva (Barbour & Fredlund, 1989).

O desafio da dissertação é reproduzir numericamente, através de um programa de elementos finitos, experimentos que evidenciam o acoplamento entre deformações, fluxos de líquidos e de solutos. O código numérico deverá ainda ser capaz de permitir a inclusão dos dois mecanismos de adensamento químico citados anteriormente, os fenômenos que os envolvem devem ser considerados e os parâmetros do modelo acoplado hidro-mecânico e químico devem ser obtidos de maneira a reproduzir satisfatoriamente os ensaios selecionados e analisados criticamente através de estudos paramétricos.

Serão utilizados como base para validação e correção do modelo os ensaios realizados por Santamarina & Fam (1995) e Fam & Santamarina (1996). Tais ensaios, edométrico modificado e de compressão isotrópica, foram realizados com um solo expansivo, uma bentonita, exposta a uma solução salina de KCl. O modelo numérico conseguiu reproduzir tais ensaios de maneira bastante satisfatória.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo Geral

Estudar e analisar os fenômenos osmóticos inerentes a solos argilosos saturados. Este entendimento global envolve a compreensão da configuração estrutural dos minerais argílicos e de sua interação com a água ionizada dos poros. O estudo dos diversos mecanismos de fluxos e como estes interferem nos mecanismos de adensamento químico são fundamentais

para as corretas considerações numéricas. De forma mais aprofundada, o adensamento osmótico e o adensamento osmoticamente induzido deverão ser detalhadamente analisados e seus efeitos claramente entendidos.

Um outro aspecto importante na dissertação é o entendimento físico dos parâmetros de acoplamento introduzidos na formulação, são eles: a eficiência osmótica (ω), a constante cinética (β) e o termo de razão entre os coeficientes de variação volumétrica geoquímico e mecânico (ζ). Através de casos reportados da literatura, dos ensaios laboratoriais de Santamarina & Fam e da experiência adquirida pela análise de sensibilidade esses parâmetros de entradas para o modelo foram determinados.

1.2.2 Objetivo específico

O objeto específico da dissertação é reproduzir os ensaios de Santamarina & Fam (1995) de modo a alcançar a validação do código proposto, no que se refere ao acoplamento hidromecânico e geoquímico para meios porosos saturados. Dentro dessa abordagem, se pretende formular um modelo capaz de simular satisfatoriamente os efeitos físico-químicos inerente a solos de granulometria fina. Para tanto, a modelagem numérica deverá reproduzir qualitativa e quantitativamente o comportamento do solo estudado por Santamarina & Fam submetidos a diferentes ações químicas e mecânicas (aplicação de carga e exposição a soluções salinas) que causam deformações e induzem fluxos de diferentes naturezas.

As análises numéricas serão realizadas utilizando-se o código computacional CODE_BRIGTH, *COupled DEformation BRIne Gas and HEat Transport*, desenvolvido por Olivella et al. (1995) e complementado por Guimarães (2002) com a introdução do acoplamento químico. O CODE_BRIGTH é um programa de elementos finitos que utiliza o método de Newton-Raphson para resolver os sistemas não lineares resultantes da discretização das equações envolvidas no problema.

1.3 ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

A dissertação está estruturada em quatro partes, cada uma contendo um capítulo com temas específicos. Além do primeiro capítulo de introdução e o último de referências bibliográficas.

Capítulo 2 – Fenômenos osmóticos em argilas saturadas

Nesse capítulo é realizada uma revisão bibliográfica sobre o comportamento dos solos argilosos quando exposto ao meio propício à contaminantes químicos inorgânicos (soluções salinas). Desta maneira, serão explorados os conceitos de níveis estruturais do mineral de argila, enfatizando o comportamento microestrutural desse material. Serão apresentados também os fenômenos que envolvem a teoria da dupla camada difusa e as possíveis naturezas de fluxos quando os efeitos químicos são considerados. A teoria da dupla camada difusa é empregada ainda para justificar o comportamento químico-mecânico das argilas, através dos mecanismos de adensamento osmóticos.

Capítulo 3 – Formulação matemática

Descreve a formulação matemática adotada para o problema acoplado hidro-mecânico e geoquímico para meios porosos saturados. São definidos, portanto, as equações de conservação de massa de água (fluxo de água) e de soluto (fluxo de soluto), as equações de equilíbrio de tensões, as relações constitutivas do problema acoplado hidro-mecânico e químico. Será apresentada uma breve revisão sobre o princípio das tensões efetivas, expondo conceitos como tensões efetivas verdadeiras e tensões efetivas modificadas quimicamente. Por fim, serão descritos dois esquemas numéricos para resolver o problema acoplado.

Capítulo 4 – Análise dos resultados

Nesse capítulo será apresentada a metodologia utilizada por Santamarina & Fam (1995) para realização do ensaio edométrico modificado em solos argilosos. Assim sendo, as propriedades do material utilizado no experimento, os valores ajustados dos parâmetros necessários à simulação, a descrição das condições de contorno e condições iniciais aplicadas na modelagem numérica serão detalhadamente expostos.

Os resultados encontrados com a simulação numérica serão demonstrados e discutidos. A apresentação dos resultados será realizada por meio de duas etapas. Na primeira, serão obtidos os parâmetros do modelo a partir das respostas experimentais do ensaio edométrico de Santamarina & Fam (1995). Posteriormente, com os parâmetros obtidos nesse ensaio, será feita a modelagem do ensaio triaxial modificado, realizado por estes mesmos autores. Na segunda etapa, analisar-se-á a sensibilidade do código numérico aos parâmetros chave do modelo hidro-mecânico e geoquímico introduzidos, são eles, os parâmetros de acoplamento e a permeabilidade intrínseca do meio.

Capítulo 5 – Conclusões e sugestões para pesquisas futuras

São apresentadas as conclusões desta dissertação e sugestões para pesquisas futuras visando à continuidade dos trabalhos aqui iniciados.

CAPÍTULO 2

FENÔMENOS OSMÓTICOS EM ARGILAS SATURADAS

2.1 INTRODUÇÃO

O termo argila é empregado em mineralogia para designar o conjunto de minerais com partículas de pequeno tamanho, pertencente à família dos silicatos. A classe mineral dos silicatos é uma das mais importantes, posto que 25% dos minerais conhecidos são silicatos e cerca de 40% deles são mais ocorrentes. Atualmente, a ciência dos materiais define os minerais de argila como sendo materiais porosos nanoestruturados com espaços interlaminares confinados (Díaz, 2004).

Por serem constituídas de minerais cristalinos bastante pequenos, as argilas se caracterizam por possuírem uma grande superfície específica e por apresentarem carregamento negativo na superfície de suas partículas (Lambe e Whitman, 1969). Devido a isto, o comportamento de um solo argiloso é fortemente influenciado pelas forças e/ou fenômenos de superfícies.

O surgimento de uma carga elétrica negativa na superfície dos minerais argílicos se deve principalmente às substituições isomórficas que ocorrem em sua estrutura cristalina (Lambe e Whitman, 1969). De acordo com os princípios eletrostáticos, os cátions serão atraídos e os ânions repelidos pela ação do carregamento negativo das argilas. Isto confere aos solos uma distribuição não homogênea dos íons da solução. Estes fenômenos eletrostáticos de superfícies dos minerais argílicos podem ser definidos matematicamente através dos conceitos da teoria da dupla camada difusa (Mitchell, 1993).

De forma simplificada pode-se entender que a dupla camada difusa é o sistema formado pela superfície negativa das partículas de argila e a distribuição das cargas, positivas e negativas, adjacentes. Sendo os fenômenos de superfícies responsáveis pelo equilíbrio momentâneo dessa configuração (Mitchell, 1993). A consideração desta teoria é essencial para a previsão e a compressão do comportamento mecânico dos solos argilosos empregados na engenharia geotécnica. Mudanças na espessura da dupla camada decorrentes, por exemplo, da alteração da composição química da água dos poros, causam variações de volume em solos argilosos quimicamente ativos (Di Maio, 1996).

Um outro aspecto do comportamento coloidal das argilas é a verificação da existência de diferentes tipos de fluxos, quando se submete um solo argiloso a um determinado gradiente de potencial. Esses fluxos podem ser diretos ou acoplados de acordo com sua natureza e a natureza do gradiente que o induz. Isto é ocasionado pela ação das forças eletrostáticas de atração e de repulsão que restringem o movimento dos íons da solução. Os fluxos acoplados de osmose-química (fluxo osmótico de líquido) e ultrafiltração (fluxo de soluto por gradiente de pressão hidráulica) vêm sendo utilizados por diversos autores para compreensão do comportamento das argilas expostas a uma solução concentrada salina (Mitchell, 1991).

Os parâmetros de compressibilidade e permeabilidade dos solos argilosos são influenciados pelas interações físico-químicas entre as partículas de argila e a água ionizada dos poros. Devido a isto, o adensamento dos solos argilosos terá dependência com as variações do estado geoquímico. Quando um solo argiloso está exposto a soluções salinas concentradas, dois mecanismos de adensamento químico são possíveis: o adensamento osmótico e o adensamento osmoticamente induzido (Babour & Fredlund, 1989).

O adensamento osmótico está relacionado com a interação físico-química das partículas. Observa-se que um aumento na concentração dos íons resulta na retração da dupla camada e conseqüente tendência de diminuição de volume do solo. Por outro lado, o adensamento osmoticamente induzido, é devido ao fluxo de água que sai da amostra pela ação de gradiente osmótico, gerando poro pressões negativas e aumentando conseqüentemente a tensão efetiva (Barbour & Fredlund, 1989).

A consideração dos efeitos do adensamento químico representa um ganho significativo na compreensão do comportamento mecânico dos solos argilosos. Estudos realizados por Peters & Smith (2004), Barbour & Fredlund (1989), Santos & Perez (2001), Frydman & Fontoura (2001), entre outros, mostram que a aplicação desses conceitos de maneira coerente pode representar aumento de estabilidade e segurança as obras geotécnicas.

2.2 NÍVEIS ESTRUTURAIS DO MINERAL DE ARGILA

Recentemente vem crescendo o interesse do meio científico sobre a consideração da existência de dois níveis estruturais para os minerais argílicos: um nível microestrutural, onde dominam os fenômenos físico-químicos, e um nível macroestrutural com predominância do comportamento granular do material (dilatância, fenômenos capilares, etc). Esta consideração de diferentes níveis estruturais tem como base as evidências de que as partículas elementares das argilas são quimicamente ativas, com o comportamento regido por teorias como a da dupla camada difusa. Ao mesmo tempo os solos argilosos apresentam um comportamento granular descrito tipicamente por teorias como a da plasticidade.

Gens & Alonso (1992) propuseram um modelo constitutivo capaz de descrever o comportamento mecânico e hidráulico das argilas quimicamente ativas que permitiu a posterior inclusão de variáveis ambientais ou geoquímicas (Guimarães, 2002). Este modelo tem como principal característica a definição dos dois níveis estruturais para o solo argiloso: o nível microestrutural e o macroestrutural.

Neste modelo conceitual de material com dois níveis estruturais, a macroestrutura corresponde aos grãos macroscópicos ou grumos, formados pela união das partículas elementares de argila e dos vazios existentes entre esses elementos (Figura 2.1a). Os grumos conferem à macroestrutura um esqueleto sólido que atuam como se fossem partículas de areias em um solo granular. Na macroestrutura se verifica o domínio de fenômenos capilares sobre os de superfícies, típicos da microestrutura. Sendo assim, o comportamento da macroestrutura pode ser descrito por meio de conceitos e modelos clássicos da geotecnia (como tensões efetivas e modelos elasto-plásticos).

A microestrutura da argila é constituída pelas partículas elementares dos minerais quimicamente ativos e pelos microporos que as interligam (Figura 2.1b). Seu comportamento depende das interações físico-químicas entre as partículas de argila de superfície negativamente carregada e a água intersticial ionizada (Sánchez *et. al.*, 2005).

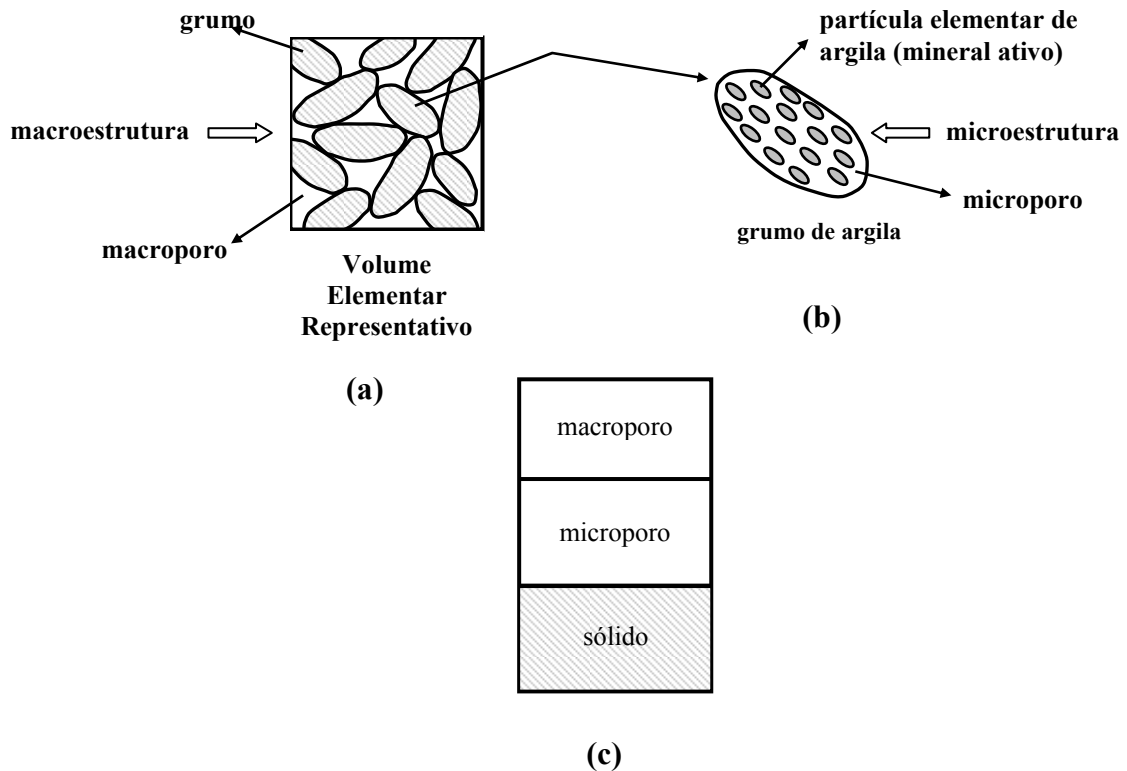


Figura 2.1 – Meio poroso de dupla estrutura. (a) representação esquemática da macroestrutura. (b) representação esquemática da microestrutura. (c) diagramas de fases.

O modelo proposto por Gens & Alonso (1992) tem como foco a formulação de um mecanismo capaz de permitir a interação entre os níveis estruturais. A hipótese básica é que a macroestrutura não influencie o comportamento da microestrutura. Segundo os citados autores, isto seria razoável, tendo em vista que, é inverdade que variáveis não locais afetem as interações físico-químicas básicas. Entretanto, o inchamento e a retração dos minerais ativos causam reacomodações no esqueleto sólido do solo, modificando ou reorganizando irreversivelmente a matriz macroestrutural.

Nesse contexto, o modelo sugere um acoplamento unidirecional entre os dois níveis estruturais, onde o comportamento (elástico) da microestrutura independe do comportamento da macroestrutura. Porém, a microestrutura induz na macroestrutura deformações plásticas (irreversíveis). É possível se alcançar esse nível de acoplamento através de funções de interações entre os dois níveis estruturais do mineral de argila (Guimarães, 2002).

Maiores esclarecimentos sobre o nível microestrutural das argilas estarão expostos ao longo desse trabalho. Detalhamentos sobre a distinção dos níveis estruturais da argila também poderão ser encontradas nas referências Gens & Alonso (1992), Guimarães (2002), Díaz (2004), Sánchez *et. al.* (2006).

Neste trabalho utilizou-se do conceito de material de dupla estrutura para se introduzir uma lei cinética de primeira ordem entre o potencial químico das águas micro e macroestruturais, a qual expressa a velocidade de transferência da água entre os níveis estruturais. Com isso foi possível melhorar substancialmente a reprodução numérica dos ensaios de Santamarina & Fam, objetivo principal da dissertação.

2.3 MINERALOGIA DAS ARGILAS E DUPLA CAMADA DIFUSA

As partículas de argila são compostas por minerais cristalinos de tamanho microscópico, denominados minerais argílicos ou argilo-minerais. Os minerais argílicos apresentam estruturas laminares, constituídas por silicatos de alumínio, de magnésio e de ferro, assim como outros minerais cristalinos amorfos (Jucá, 1990).

A estrutura de todos os minerais argílicos, Figura 2.2a, podem ser compreendida a partir de suas estruturas laminares, Figura 2.2b. Estas, por sua vez, são constituída pela combinação de distintas maneiras das redes cristalinas, Figura 2.2c e 2.2d. As redes cristalinas são formadas pelo arranjo das unidades cristalográficas, os cristais, Figura 2.2e e 2.2f. A Figura 2.2 ilustra uma microscopia eletrônica de varredura de uma montmorilonita e o detalhamento das estruturas laminares.

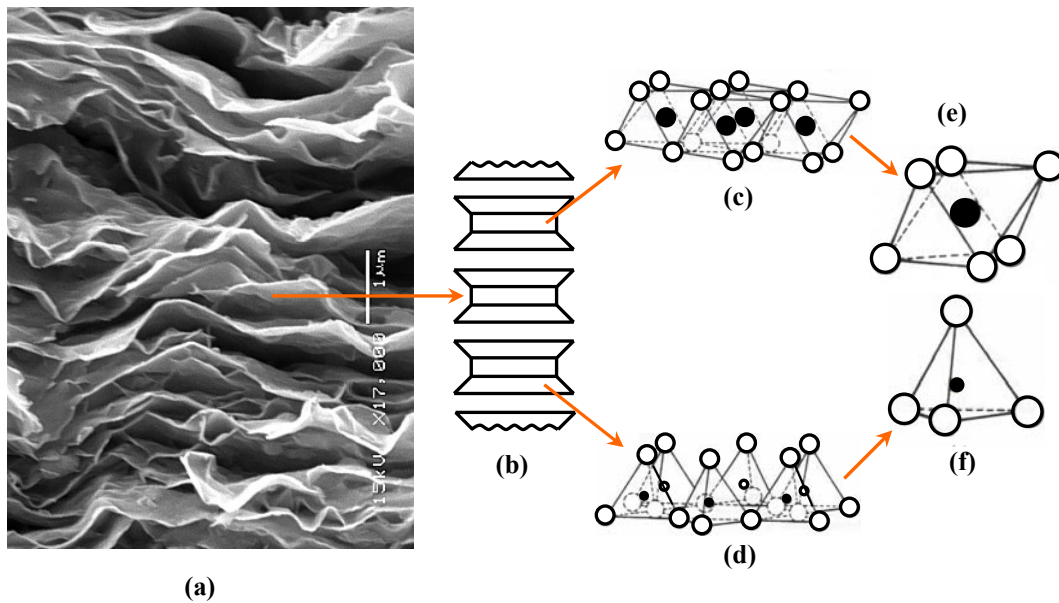


Figura 2.2 – Representação esquemática da estrutura laminar da argila. (a) visão microscópica de uma montmorilonita sódica estratificada e seca (Sociedade Brasileira de Microscopia e Microanálise, 2006). (b) estrutura laminar de uma montmorilonita. (c) rede cristalina octaédrica. (d) rede cristalina tetraédrica. (e) unidade cristalográfica octaédrica. (f) unidade cristalográfica tetraédrica (Mitchell, 1993).

Essencialmente, essas estruturas cristalinas laminares dos minerais argílicos podem ser constituídas de duas espécies distintas de unidades cristalográficas elementares: tetraedros com um átomo de silício no centro e quatro átomos de oxigênio nos vértices, Figura 2.3; ou octaedros com um átomo de alumínio ou de magnésio no centro e seis átomos de oxigênio nos vértices, Figura 2.4.

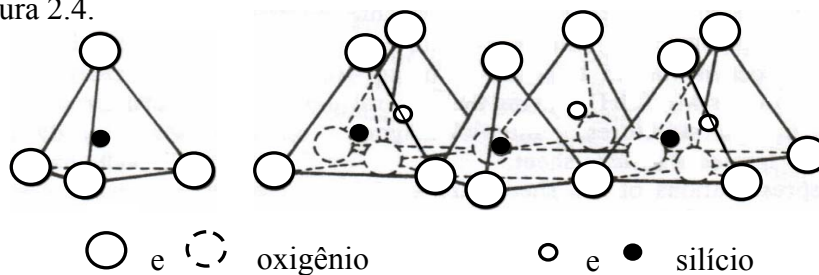


Figura 2.3 – Tetraedro de silício camada estrutural de unidades tetraédricas (Mitchell, 1993).

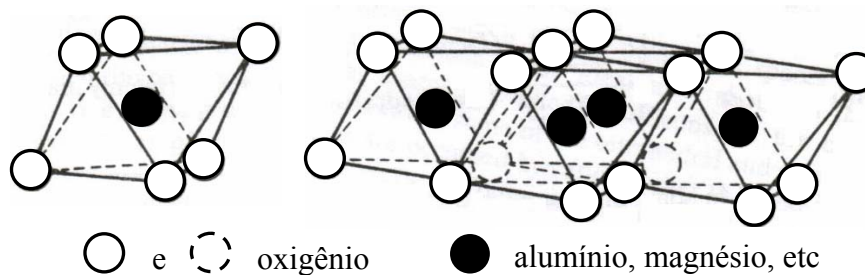


Figura 2.4 – Unidade octaédrica e camada estrutural de unidades octaédricas (Mitchell, 1993).

A configuração dos cátions no centro dos tetraedros e octaedros se dá durante a formação do mineral e resultará posteriormente nas possíveis trocas de átomos de minerais. A maneira como se dá o arranjo dos desses átomos nas unidades cristalográficas juntamente com a formação e a ligação das lâminas são essenciais na formação dos diferentes grupos de minerais argílicos. Uma estrutura completa de minerais de argila consiste em uma das muitas combinações possíveis entre as lâminas octaédricas e tetraédricas (Dana, 1984).

Os minerais de argila podem ser classificados em três categorias de unidades estruturais: argilas dimórficas, cujos minerais estão constituídos por camadas alternadas de tetraedros e octaedros (ex. caulinita, Figura 2.5a); argilas trimórficas, nas quais existem duas camadas de tetraedros entre os quais se situa uma de octaedros (ex. ilita, esmectita, Figura 2.5b, vermiculita e pirofilita); e argilas de camada mista, que consiste de uma camada de interstratificação, regular ou aleatória, de minerais de duas ou três camadas diferentes (ex. esmectita-ilita, Figura 2.5c) (Jucá, 1990; Mitchell, 1993).

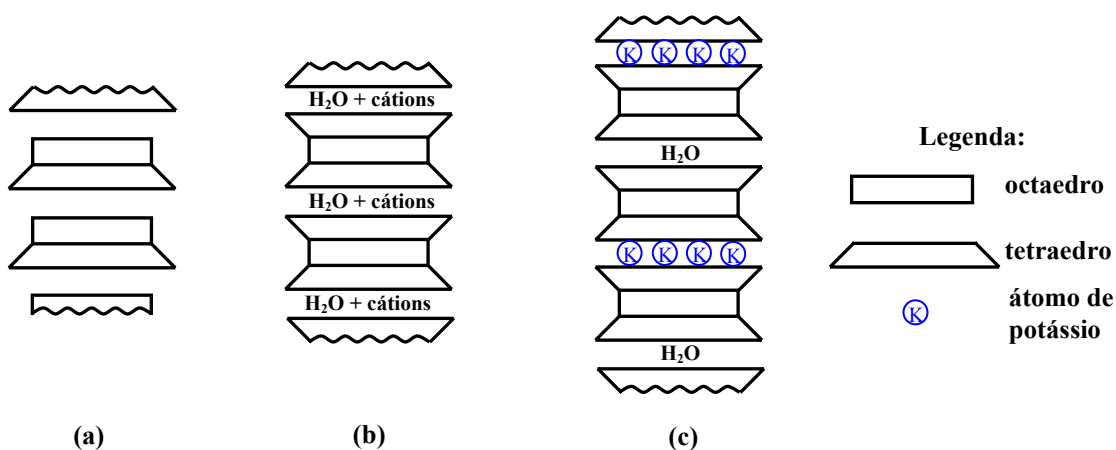


Figura 2.5 – Diagramas das estruturas dos minerais argílicos. (a) caulinita, (b) esmectita, (c) esmectita-ilita (Mitchell, 1993).

As ligações entre as sucessivas camadas das estruturas das argilas dimórficas são dadas por forças do tipo van der Waals e por pontes de hidrogênio. Já para as argilas trimórficas, essas ligações se dão por meio das forças de van der Waals (montmorilonita) ou através dos cátions presentes no balanço de carga na estrutura da argila (ilita), quando há carga estrutural não compensada (Mitchell, 1993).

A tendência dos minerais de argila de formarem cristais de morfologia laminar e o pequeno tamanho das suas partículas lhes conferem uma área de superfície importante. Sua superfície,

portanto, apresenta uma alta reatividade físico-química com o meio poroso. Desta maneira, as interações eletrostáticas produzidas na superfície das partículas são funções do pH, dos cátions adsorvidos e da salinidade do meio aquoso. Esses efeitos em conjunto com as características cristal químicas são responsáveis pelo comportamento físico-químico e mecânico, pelas propriedades coloidais e reológicas das argilas (Díaz, 2004).

O conceito de superfície específica refere-se à relação entre a superfície total de um conjunto de partículas e o seu peso. O tipo e o predomínio das forças que atuam nas partículas do solo estão diretamente associados à grandeza de sua superfície específica (Jucá, 1990). As cargas de superfícies nos minerais do solo é na maioria das vezes uma carga elétrica negativa (Lambe e Whitman, 1969). A influência dessa carga elétrica na interação entre as partículas está diretamente relacionada com a superfície específica das mesmas.

O excesso de carga negativa tem importante implicação nas propriedades físicas e químicas das argilas, tais como: seu inchamento, hidratação, o comportamento reológico e as propriedades ácido/base. A ocorrência da carga elétrica negativa na superfície das partículas de argila é devida principalmente a substituições isomórficas dentro da rede cristalina de sua estrutura. Porém, outras propriedades, como a distribuição iônica do fluido que preenchem os poros, aspectos anisotrópicos decorrentes de defeitos cristalinos e planos de clivagem, também são relevantes e influenciam o carregamento negativo das superfícies das argilas.

As substituições isomórficas consistem na permuta entre íons distintos, sendo eles de mesma valência ou não, porém mantendo a mesma estrutura cristalina. Tais substituições se desenvolvem principalmente durante a formação dos silicatos originando uma deficiência de carga positiva nas partículas. Um exemplo comum de substituição isomórfica é a substituição do alumínio (Al^{3+}) no lugar do silício (Si^{4+}), do magnésio (Mg^{2+}) em vez do alumínio (Al^{3+}) e do ferro ferroso (Fe^{2+}) para o magnésio (Mg^{2+}) (Mitchell, 1976).

2.3.1 Teoria da Dupla Camada Difusa

Em uma argila seca, os cátions adsorvidos são fortemente mantidos pelas partículas de argila carregadas negativamente. Os demais cátions em excesso são necessários para neutralizar a

eletronegatividade das partículas de argilas. Já os ânions associados, estão presentes em forma de sais precipitados.

Quando a argila é colocada na água os sais precipitados entram na solução. Enquanto isso, os cátions adsorvidos produzem um aumento na concentração na proximidade da superfície das partículas. Deste modo, os cátions tendem a se difundir a fim de promover um equilíbrio nas concentrações, se afastando das partículas. Porém, esta liberdade de difusão é restringida pelo campo elétrico negativo que se origina das superfícies das partículas (Mitchell, 1993).

Estes dois fenômenos, a tendência de afastamento devido à difusão e a atração eletrostática, são os responsáveis pela distribuição dos íons na proximidade de uma partícula de argila em suspensão. Assim sendo, este modelo supõe que nas proximidades da superfície das argilas exista um excesso de cátions a fim de neutralizar sua carga elétrica negativa. Em contraposição, os ânions são repelidos pelas cargas negativas das partículas, como mostrado na Figura 2.6.

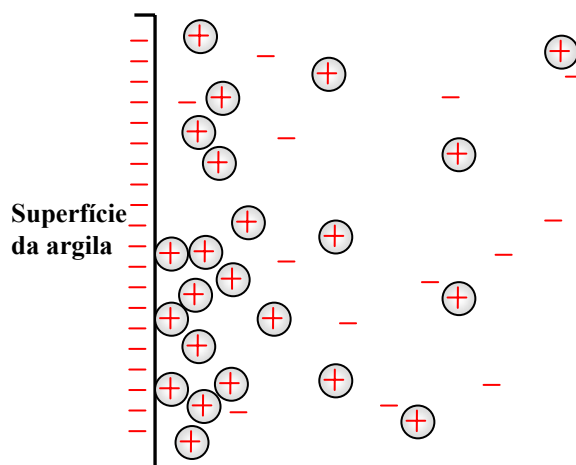


Figura 2.6 – Dupla camada difusa: superfície negativa e carga elétrica distribuída (Mitchell, 1993).

Devido ao carregamento negativo da superfície das argilas existirá uma distribuição não uniforme de cátions e ânions próxima à sua superfície. Com base nessas observações, desenvolveu-se uma teoria que instituiu a dupla camada difusa, a qual consistirá em uma parte fixa de cátions adjacentes à partícula e uma zona difusa, composta por cátions e/ou ânions dispersos. O que mantém momentaneamente em equilíbrio essa configuração são os fenômenos de superfícies.

De forma mais abrangente, pode-se definir a dupla camada difusa simplesmente como o sistema formado pela superfície negativamente carregada das partículas e a distribuição das cargas na sua proximidade (cargas positivas e negativas adjacentes). Uma outra definição para descrever o significado físico da dupla camada difusa se baseia na diferença de potencial elétrico gerada entre a partícula de argila e a água ionizada dos poros ocasionando uma possível separação de cargas elétricas.

Os modelos baseados na teoria da dupla camada difusa são os mais empregados para a interpretação do comportamento mecânico das argilas a nível microestrutural. Diversos autores tentaram explicar o comportamento de argilas através dos conceitos e fenômenos associados à teoria da dupla camada difusa. A seguir será feita uma breve revisão da evolução dessa teoria.

Diversas estruturas da dupla camada são possíveis de se idealizar, a depender da distribuição dos cátions e ânions próximos da partícula. Supondo-se a situação de uma partícula de argila carregada negativamente imersa numa solução eletrolítica, no caso, a água, portadora de contra-íons, por exemplo, os cátions. Verificam-se quatro configurações possíveis para a distribuição de carga (Sánchez *et. al.*, 2005).

A primeira possibilidade ocorre quando a população dos contra-íons for suficiente apenas para neutralizar a totalidade das cargas superficiais da partícula. Além disso, esses contra-íons deverão estar totalmente confinados a uma distância (radial), δ , a partir da superfície da argila, formando uma monocamada. Esta camada elétrica será fixa e se denominará de dupla camada Helmholtz, Figura 2.7a.

Uma outra situação ocorre quando esta monocamada de cátions existente na distância radial, δ , não é suficiente para neutralizar totalmente as cargas negativas da argila. Em função disso, surge uma camada difusa composta por contra-íons, localizada a uma distância maior que δ , sendo responsável pela plena neutralização das cargas superficiais das partículas. A esta configuração com uma camada de cátions dispersos além da dupla camada fixa de Helmholtz, dá-se o nome de dupla camada de Gouy, Figura 2.7b.

A teoria desenvolvida por Gouy em 1910 e complementada por Chapman em 1913 considera que os íons são cargas pontuais sem dimensões e que não existe interação mútua entre eles. Isto resulta em valores de concentrações muito elevadas próxima a superfície da argila o que não corresponde à realidade. Na verdade, os íons têm tamanhos finitos e os raios de hidratação dos cátions determinam a máxima concentração possível em torno da superfície da argila (Mitchell, 1993).

Uma outra configuração de íons que pode existir acontece quando a dupla camada de Helmholtz apresenta mais carga positiva do que o necessário para neutralizar a totalidade das cargas superficiais da partícula. Neste caso, a camada de Gouy-Chapman se apresenta com excesso de carga positiva podendo atrair outras partículas carregadas negativamente. Este é o sistema químico estrutural das argilas. A combinação da dupla camada de Helmholtz e da camada de Gouy-Chapman carregada de cargas positivas e negativas é denominada de camada de Stern, Figura 2.7c.

A teoria desenvolvida por Stern em 1924 é uma modificação na teoria de Gouy-Chapman, uma vez que, o tamanho dos íons hidratados na dupla camada passou a ter relevância na definição da dupla camada. De acordo com esta nova teoria a espessura da dupla camada difusa sofrerá forte influência dos tamanhos dos íons, assim como, do pH do sistema. Desta maneira, variações no tamanho dos íons ou alterações no pH acarretarão em diferentes espessuras para a dupla camada difusa (Mitchell, 1993) e conseqüente alteração nas propriedades mecânicas do material.

Ainda segundo Mitchell (1993), para soluções com a mesma molaridade, quanto maior a valência dos cátions menor será a espessura da dupla camada difusa. Efeitos similares são observados quando os cátions trocáveis são substituídos por outros de menor raio de hidratação e igual valência. De certa forma, uma retração na dupla camada difusa das partículas ocasiona um enrijecimento da argila.

Podem existir ainda casos onde a distribuição de cargas ao redor da partícula é totalmente do tipo de Gouy, ou seja, totalmente difusa, não formando a camada fixa de Helmholtz. Nesse caso, os contra-íons não são especificamente adsorvidos, isto é, não formam uma monocamada sobre a superfície sólida da partícula, Figura 2.7d.

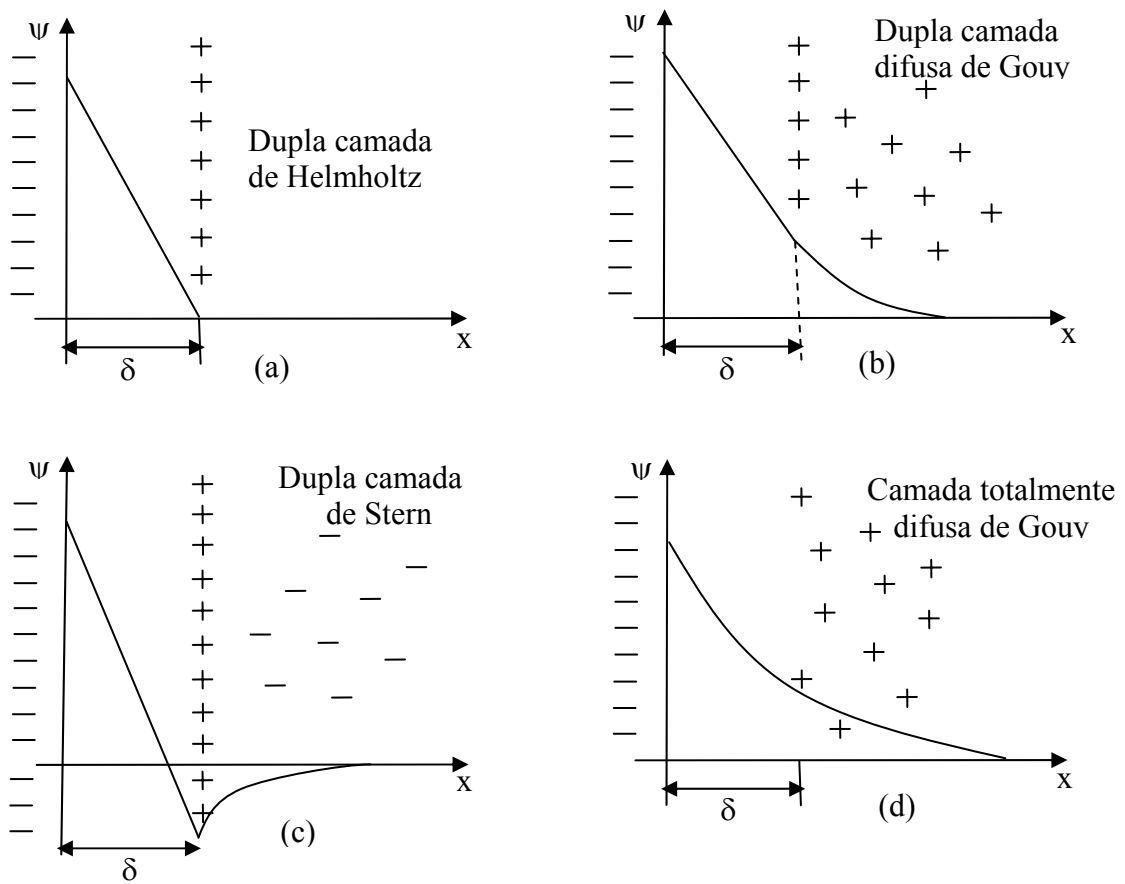


Figura 2.7 – Estruturas da dupla camada difusa – potencial (Ψ) versus distância da camada (x). (a) dupla camada de Helmholtz, (b) dupla camada difusa de Gouy-Chapman, (c) dupla camada de Stern e (d) camada totalmente difusa.

Do ponto de vista matemático, os modelos fundamentados na teoria da dupla camada difusa se baseiam na determinação do potencial elétrico (Equação 2.1) de um ponto central entre partículas de argilas paralelas. A partir do potencial elétrico, se calcula a força de repulsão entre as partículas. Sendo conhecida a distância entre as partículas, também se pode obter a força de atração (força de van der Waals). Estas forças de atração aumentam com a proximidade das partículas. No processo de expansão, a repulsão entre as partículas diminui enquanto que o volume segue aumentando até que haja equilíbrio entre atração e repulsão.

A definição do potencial elétrico satisfaz o problema de Poisson-Boltzmann definido para dupla camada difusa adjacente de superfície planar (unidimensional), dado pela Equação 2.1 (Mitchell, 1993):

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{e}{\varepsilon} \sum v_i n_{i0} \exp\left(-\frac{v_i e \psi}{kT}\right) \quad (2.1)$$

onde, ψ é o potencial elétrico; x é a distância para a superfície; e é a carga elétrica (1.602×10^{-19} Coulomb); ε é a permissividade estática do meio; v_i é a valência iônica; n_{i0} é a concentração de íons para o estado de referência; k é a constante de Boltzmann (1.38×10^{-23} J°K) e T é a temperatura (°K).

A solução do problema de Poisson-Boltzmann (Equação 2.1), a princípio, não é uma distribuição exponencial. Entretanto, para o caso particular de problemas de pequena escala, a solução da Equação 2.1 define que o potencial elétrico pode ser escrita como:

$$\psi = \psi_0 e^{-kx} \quad (2.2)$$

Neste caso particular, o potencial elétrico descreve puramente de maneira exponencial com a distância. Onde, o termo $1/k$ é a medida da espessura da dupla camada difusa, dada pela Equação 2.3:

$$v = \frac{1}{k} = \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r R T}{2 F^2 c v^2} \right) \quad (2.3)$$

onde, v é a espessura da dupla camada difusa; k é a constante de Boltzmann; ε_0 é a permissividade do vácuo; ε_r é a permissividade da água dos poros; R é a constante universal dos gases; T é a temperatura; F é a constante de Faraday; c é a concentração de soluto e v é a valência dos íons da água dos poros (Mitchell, 1993 e Barbour & Fredlund, 1989).

Este caso, entretanto, não representa as condições reais de muitos sistemas de argilas. Apesar disso, esta solução exponencial é bastante útil para entender os efeitos da variação da composição do fluido (água) intersticial na espessura da dupla camada difusa.

Analisando a Equação 2.3 verifica-se que a retração da dupla camada difusa depende dos seguintes fatores:

- aumento da concentração dos cátions da água dos poros;
- incremento na valência eletrolítica dos íons;
- redução da constante dielétrica.

Mitchell (1993) enumera diversos fatores que influenciam o comportamento da dupla camada difusa. Fatores como a concentração eletrolítica, a valência dos cátions e o tamanho dos íons hidratados na camada de Stern estariam diretamente relacionados com as variáveis geoquímicas. Portanto, é fundamental associar as variáveis geoquímicas com a teoria da dupla camada difusa para se chegar a um bom entendimento do comportamento mecânico microestrutural das argilas.

2.4 TIPOS DE FLUXOS ATRAVÉS DO SOLO

As substituições isomórficas que acontecem a nível microestrutural da estrutura cristalina conferem as partículas da argila uma carga elétrica negativa, como descrito na seção 2.3. Desta maneira, a superfície negativa das partículas atraem eletrostaticamente os cátions e repelem os ânions. Resultando, a nível macroestrutural dos solos, numa distribuição não homogênea dos íons em solução. Este fenômeno tem explicação na teoria da dupla camada difusa discutido na seção anterior.

As forças eletrostáticas de atração e de repulsão causam restrições ao movimento dos íons, sendo dependentes das variáveis de estado do sistema como a temperatura, por exemplo. Por este motivo, quando se submete um solo argiloso a um determinado gradiente de potencial, são verificados diferentes tipos de fluxos, denominados de fluxos diretos ou acoplados, a depender da natureza do fluxo e do gradiente que o induz (Mitchell, 1991).

Nos mais diversos problemas geotécnicos, deformação do solo ou rocha, estabilidade de taludes e mudanças de volume entre outros, se observa o papel decisivo e marcante dos fluxos através do meio poroso. Os mecanismos de fluxo podem condicionar ruptura e colapso em situações onde a presença do fluxo de fluido ocasiona redução das tensões efetivas e resistência do solo. Bem como, garantir a estabilidade e segurança das obras geotécnicas em circunstâncias em que os mecanismos de fluxo condicionam drenagem no solo, por exemplo. Assim sendo, o estudo dos fenômenos de transporte fluido através do meio poroso é fundamental para o perfeito entendimento do comportamento do solo.

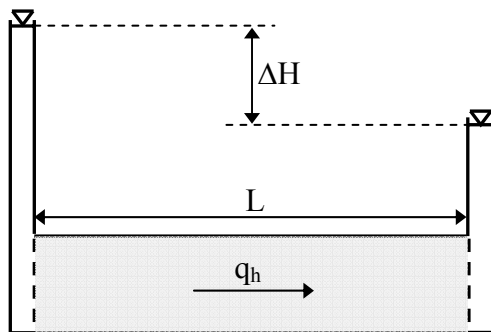
2.4.1 Fluxos Diretos

Quando se tem bem estabelecido que os processos de fluxos são promovidos sem mudanças no estado do solo, cada termo de fluxo, J_i , é relacionado linearmente com o seu respectivo gradiente potencial, X_i , através do coeficiente de condutividade L_{ii} , de acordo com a equação:

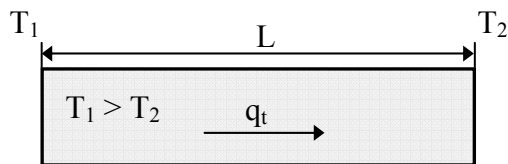
$$J_i = L_{ii} X_i \quad (2.4)$$

Desta forma, gradientes de um tipo geram fluxos de mesmo tipo, tal como, gradiente hidráulico ocasionando fluxo de fluido. Sendo estes denominados de fluxos diretos.

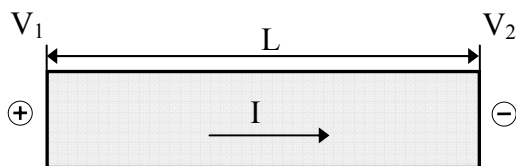
Os fluxos diretos através da massa do solo podem ser de quatro tipos: fluxo de fluido, elétrico, de calor e químico. Analisando isoladamente cada tipo de fluxo têm-se seus respectivos coeficientes de condutividades: hidráulica (k_h), elétrica (σ_e), térmica (k_t) e o coeficiente de difusão (D) para o caso químico. Assim como, seus correspondentes gradientes: hidráulico (i_h), elétrico (i_e), térmico (i_t) e químico (i_c). A representação esquemática dos diversos tipos de fluxos se encontra na Figura 2.8.

Fluxo de Fluido

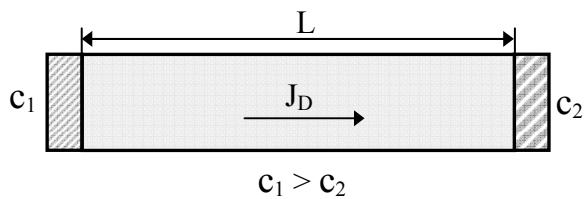
Lei de Darcy: $q_h = k_h i_h$

Fluxo de Calor

Lei de Fourier: $q_t = k_t i_t$

Fluxo Elétrico

Lei de Ohm: $I = \sigma_e i_e$

Fluxo Químico

Lei de Fick: $J_D = D i_c$

Figura 2.8 – Tipos de fluxos diretos através da massa do solo (Mitchell, 1991).

O fluxo de água tem sido intensivamente estudado devido a sua grande importância nos problemas geotécnicos, tendo em vista que, seus efeitos são facilmente observados na maioria dos solos utilizados na prática da engenharia. Como resultado, tem-se que a condutividade hidráulica e permeabilidade intrínseca do meio, parâmetros associados ao problema de fluxo de fluido, sejam já bastante estudados e conhecidos.

Em determinadas circunstâncias os fluxos químicos, térmicos e elétricos também são bastante importantes. Os fluxos químicos, por exemplo, são fundamentais quando se verifica poluição das águas subterrâneas, em barreiras para armazenamento de resíduos e efeitos osmóticos em camadas de argila. Os fluxos de calor são importantes quando se faz necessária construção de área congelada, estabilização temporária do solo por resfriamento. Fluxos elétricos se tornam relevantes nos casos de transporte de água e estabilização por eletroosmose, corrosão, entre outros (Mitchell, 1993).

2.4.2 Fluxos Acoplados

Nos mais diversos casos encontrados na geotecnia se verificam a ocorrência simultânea dos diferentes tipos de fluxos vistos acima, mesmo quando apenas um tipo de potencial está agindo sobre o sistema.

Dentro dessa abordagem, observa-se que outros tipos de fluxo ocorrem mesmo que o gradiente de potencial em questão não seja aquele de mesma natureza física que o fluxo analisado. A estes mecanismos de transporte dá-se o nome de fluxos acoplados (Equação 2.5).

$$J_i = L_{ij} X_j \quad (2.5)$$

Um exemplo desses fluxos é o acoplamento termo-hidráulico, o qual explica a origem das células de convecção natural, verifica-se, nesse caso, que o gradiente térmico impulsiona o deslocamento do fluido no sistema.

O termo L_{ij} refere-se aos coeficientes de acoplamento do fluxo, J_i , gerado por um gradiente potencial, X_j . Seus efeitos podem ou não ter magnitudes significantes a depender das características do solo e do problema que se pretende analisar. Na Tabela 2.1 estão listados os tipos de fluxos que podem ocorrer no meio poroso de baixa permeabilidade. Os termos da diagonal principal da tabela 2.1 referem-se os fluxos diretos.

Tabela 2.1 – Fluxos diretos e acoplados (Mitchell, 1993).

FLUXOS	GRADIENTES			
	HIDRÁULICO	CONCENTRAÇÃO	TÉRMICO	ELÉTRICO
FLUIDO	Lei de Darcy	Osmose-química	Termo-osmose	Eletro-osmose
SOLUTO	Ultrafiltração	Lei de Fick	Efeito Soret	Eletro-migração
CALOR	Termo-filtração	Efeito Dufour	Lei de Fourier	Efeito Peltier
CARGA ELÉTRICA	Fluxo de corrente	Difusão e potencial de membrana	Efeito Seebeck	Lei de Ohm

Mitchell (1991) observa que para solos argilosos pouco permeáveis, cuja condutividade hidráulica é menor que 10^{-9} m/s, os fluxos termo-osmótico e químico osmótico de líquido e os fluxos químicos difusivos começam a ter importância frente aos fluxos gerados por gradiente hidráulico.

Em determinadas situações dependendo do gradiente gerado e das condições a que o solo está submetido, se verifica o predomínio de certo tipo de fluxo sobre outro. Assim, por exemplo, o fenômeno termo-osmótico, deslocamento de água sob gradiente de temperatura, é importante em solos não saturados, mas apresenta efeito limitado em solos saturados. A eletroforese, fluxo de íons pela aplicação de potencial elétrico, pode ser observada quando é detectada presença de esgoto e alta umidade do solo (Mitchell, 1991).

Segundo Mitchell (1991) os mecanismos de transporte de maior relevância no comportamento dos solos são: termo-osmose, eletro-osmose, osmose-química, termo-filtração, ultrafiltração e eletroforese. Nesse trabalho se tratará apenas dos fluxos de fluido e de íons causados por gradiente hidráulicos e de concentração. Desta maneira, o fluxo de líquido será dado pela lei de Darcy acrescida do fenômeno da osmose-química. Enquanto que o fluxo de íons será quantificado pela soma algébrica de dois efeitos: a difusão molécula, dada pela lei de Fick; e a ultrafiltração ou osmose reversa (Peters & Smith, 2004). Portanto, não se considerará nenhum tipo de fluxo de calor ou eletricidade, bem como, outros tipos de fluxos gerados pela aplicação desses gradientes.

Na verdade, o potencial elétrico irá existir mesmo que não se considere um gradiente elétrico externo. A condição de corrente elétrica nula só será verdadeira respeitando-se a condição eletro-neutralidade, onde o movimento de íons devido a ações elétricas será compensado em termos do gradiente hidráulico e de concentração. A condição de eletro-neutralidade foi obedecida nesse trabalho, portanto a matriz de fluxos através do solo (Tabela 2.1) será uma matriz 2x2, de fluxos e gradientes hidráulicos e de concentrações.

A osmose-química, movimento de água devido a um gradiente de concentração, tornou-se melhor compreendida após os estudos realizados por Barbour & Fredlund em 1989. Este mecanismo é denominado de fluxo osmótico de água e expressa apenas a passagem de solvente, através de uma membrana semipermeável perfeita, de uma solução menos concentrada para uma região de maior concentração na tentativa de equilibrar o sistema, Figura 2.9. A diferença de pressão entre estas duas soluções é denominada de pressão osmótica (π). A pressão osmótica (π) pode ser estimada pela equação apresentada por van Hoft em 1890 para soluções diluídas, Equação 2.6:

$$\pi = R T c \quad (2.6)$$

onde, π é a pressão osmótica, R é a constante universal dos gases, T é a temperatura e c é a concentração de solutos.

A sucção osmótica representa uma das componentes da sucção total de um solo, a outra componente é a sucção matricial. A primeira está associada à concentração química da solução no solo, enquanto a segunda é resultado da junção da força de adsorção e capilaridade gerada pela tensão superficial (sucção matricial ou pressão capilar).

A sucção matricial se manifesta exclusivamente em solos não saturados, enquanto que a sucção osmótica pode ser observada também em solos saturados quando submetidos a variações na concentração do soluto na água do solo. Sendo nesse caso, atribuída à interação química entre as partículas de argila e os íons dissolvidos na água (Mitchell, 1993). Nas análises apresentadas nesse trabalho apenas a sucção osmótica será considerada, uma vez que, o solo está saturado.

O fluxo osmótico pode ser descrito usando uma lei de fluxo similar à lei de Darcy, como mostra a Equação 2.7:

$$\mathbf{q}_\pi = \mathbf{k}_\pi \nabla \pi = \omega \mathbf{k}_h RT \nabla c \quad (2.7)$$

onde q_π é o fluxo de água devido ao efeito osmótico; k_π é o coeficiente de condutividade osmótica; k_h é coeficiente de condutividade hidráulica e ω é a eficiência osmótica.

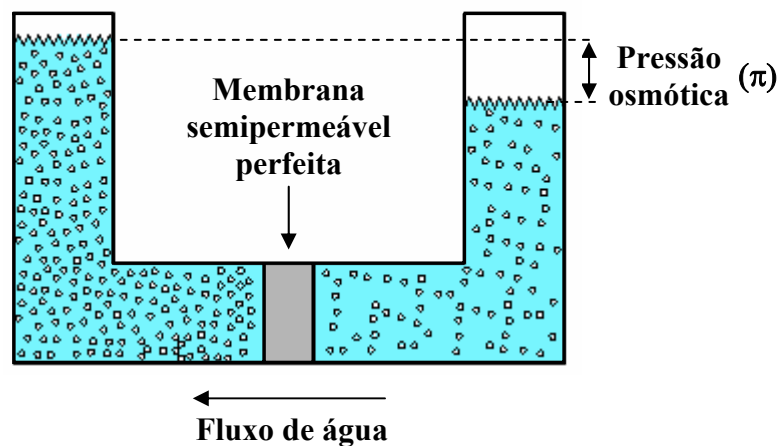


Figura 2.9 – Fluxo osmótico de água através de uma membrana semipermeável perfeita.

Em muitos casos a membrana além de permitir a passagem de solvente não restringe totalmente a passagem de solutos, ou seja, funciona como uma membrana semipermeável imperfeita. Deste modo, aparecerá a migração de íons das zonas de baixa concentração para áreas de concentração mais elevada. Tal fluxo de soluto será impulsionado pelo efeito membrana do material, apresentado mesmo sentido do fluxo osmótico.

O movimento de soluto poderá ocorrer também pela diferença de carga hidráulica gerada através da membrana, fenômeno da ultrafiltração, definido pela equação a seguir:

$$i_c = L \nabla h \quad (2.8)$$

onde, i_c é o termo de fluxo de soluto devido a ultrafiltração; L é o coeficiente de acoplamento recíproco de Onsager e ∇h é o gradiente hidráulico.

O termo da ultrafiltração é introduzido na quantificação do fluxo de soluto com base na teoria das relações recíprocas de Onsager, estas relações serão descritas no capítulo 3, seção 3.2.3. A ocorrência do fluxo osmótico de água por gradiente de concentração acarretará de maneira recíproca e simultânea no surgimento do fluxo de íons pela ação de um gradiente hidráulico. Por este motivo, o termo ultrafiltração também é conhecido como efeito osmótico reverso (Peters & Smith, 2004).

2.5 MECANISMO DE ADENSAMENTO QUÍMICO

As mudanças de volume dos solos argilosos saturados ocorrem num longo período de tempo devido a sua baixa condutividade hidráulica. Os parâmetros que controlam seu comportamento hidro-mecânico no tempo são: a compressibilidade do solo, que relaciona as mudanças de volume com as modificações no estado de tensão efetiva; e a permeabilidade, que representa a medida da aptidão do solo em permitir fluxo de fluidos em seus poros (Barbour & Fredlund, 1989).

A mecânica dos solos tradicional considera o adensamento mecânico como único mecanismo de mudança de volume dos solos argilosos. Entretanto, evidências experimentais amplamente difundidas na literatura confirmam a grande influência de variáveis químicas no comportamento desses materiais (Santamarina & Fam, 1995; Fam & Santamarina, 1996), fenômeno não contemplado pela teoria do adensamento clássica. Devido isso, a teoria da dupla camada difusa vem sendo usada cada vez mais para explicar este comportamento químico-mecânico das argilas. Por exemplo, de acordo com a equação 2.3, um acréscimo na concentração de sais acarreta retração na espessura da dupla camada difusa.

As variações do estado geoquímico do solo são capazes de induzir deformações e fluxos osmóticos, que em determinadas situações não se podem desprezar (Guimarães, 2002).

Algumas aplicações em meio poroso de baixa permeabilidade relacionada com a geotecnia ambiental, engenharia de petróleo e hidrogeologia podem ser encontradas em referências como: Barbour & Fredlund, 1989; Peters & Smith, 2004; Frydman & Fontoura, 2001.

As pesquisas envolvendo este assunto iniciaram-se na engenharia geotécnica com Greenberg *et al.* em 1973. Estes autores consideraram pela primeira vez o adensamento mecânico e químico de maneira acoplada, embora seus resultados não tenham apresentado grandes efeitos. Mais recentemente Barbour & Fredlund (1989) e Santamarina & Fam (1995) apresentaram programas de análises experimentais acoplando fluxo de sal e água em várias argilas. Ambos utilizaram bases teóricas para analisar seus resultados, conseguindo bom entendimento de suas análises. Kaczmarek (2001) e Kaczmarek & Hueckel (1998) empregaram um modelo linear para encontrar a solução analítica dos fenômenos apresentados por Barbour & Fredlund (1989). Recentemente, Peters & Smith (2004) também estudaram estes fenômenos em barreiras de argila para contenção de resíduos.

Os termos técnicos que envolvem os mecanismos de adensamento químico ainda não apresentam uma nomenclatura universal. Nessa dissertação será adotada a nomenclatura encontrada em Barbour & Fredlund (1989). Segundo estes pesquisadores, quando um solo argiloso está exposto a soluções salinas concentradas, dois mecanismos de adensamento são possíveis: o adensamento osmótico e o adensamento osmoticamente induzido.

O adensamento osmótico está relacionado com a interação físico-química em nível de partícula, onde se verifica que um aumento na concentração dos íons resulta na retração da dupla camada e conseqüente tendência de retração do solo. Por outro lado, o adensamento osmoticamente induzido, é devido ao fluxo de água que sai da amostra pela ação de gradiente osmótico, gerando pressões de poros negativas e aumentando conseqüentemente a tensão efetiva. Nas próximas seções será apresentada a teoria detalhada desses fenômenos de mudança de volume.

2.5.1 Adensamento Osmótico

Quando se submete uma argila a uma solução salina concentrada, o sal é transportado através dos poros por difusão molecular, alterando as interações eletrostáticas entre as partículas de argila. Como consequência disto, se verifica redução na espessura da dupla camada difusa, resultando finalmente, na diminuição do índice de vazios do solo.

Esta tendência de retração da argila, devido a sua baixa permeabilidade, tem como resposta não drenada a geração de poro pressões positivas. Em outras palavras, o carregamento químico causa diminuição da pressão efetiva do solo. O excesso de pressão de poro gerada se dissipa lentamente na medida em que a amostra se deforma. A este mecanismo se denomina adensamento osmótico, (Barbour & Fredlund, 1989; Peters & Smith, 2004).

Desta forma, o adensamento osmótico está intimamente relacionado com as interações físico-químicas a nível microestrutural das partículas de argila. Para que se incluam as chamadas forças elétricas de interpartícula no conceito de tensão efetiva é possível estender o princípio clássico das tensões efetivas de Terzaghi (Equação 2.9). Isso pode ser alcançado pela introdução de uma nova variável de estado de tensão, representando as forças eletrostáticas.

$$\sigma' = \sigma^* + (R_{DL} - Att) = \sigma - P_t \quad (2.9)$$

onde, σ' corresponde a tensão efetiva de Terzaghi; σ^* é a tensão efetiva “verdadeira”, que é a pressão intergranular transmitida pelo contato partícula partícula; $(R_{DL}-Att)$ é a força de repulsão elétrica de interpartícula subtraída da força de atração elétrica de interpartícula; σ é a tensão total e P_t é a poro pressão (Barbour & Fredlund, 1989; Mitchell, 1993; Peters & Smith, 2004).

Segundo Barbour & Fredlund (1989) a expressão da tensão efetiva só seria satisfatória com a medição do termo $R_{DL}-A_{tt}$ sob condições ideais. Além disso, alterações em $R_{DL}-A_{tt}$ não representariam essencialmente mudanças no comportamento do solo. Desta maneira, estes

autores propuseram que a descrição do adensamento osmótico deveria ser realizada utilizando o conceito de superfície de estado baseado nas tensões efetivas e pressão osmótica:

$$e = e(\sigma', \pi) \quad (2.10)$$

onde, e corresponde ao índice de vazios do solo.

Desse modo, a mudança de volume dos solos argilosos por adensamento osmótico, poderá ser descrita pela Equação 2.11:

$$d\varepsilon = -\frac{dV}{V} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial \sigma'} d\sigma' + \frac{\partial V}{\partial \pi} d\pi \right) \quad (2.11)$$

onde, ε é a deformação volumétrica; σ' é a tensão efetiva e V é o volume inicial do solo. Esta expressão mostra a relação da variação de volume com a variação da pressão osmótica.

2.5.2 Adensamento Osmoticamente Induzido

O mecanismo de adensamento osmoticamente induzido ocorrerá como resposta do fluxo acoplado de líquido num solo argiloso devido ao gradiente de potencial osmótico (ou sucção osmótica). Nesse caso, quando se expõe um solo argiloso a uma solução salina, se observa a geração de um fluxo osmótico de líquido. A água será expulsa do solo induzindo a geração de poros pressões negativas ($P_1 < 0$). A saída de água resultará no aumento das tensões efetivas e conseqüentemente retração do solo.

O adensamento osmoticamente induzido está relacionado unicamente com variações na tensão efetiva. Ao contrário do que se verifica com o adensamento osmótico, o mecanismo da química da água dos poros não afeta diretamente o comportamento mecânico dos solos argilosos. Os efeitos químicos atuam indiretamente através do problema hidráulico, ou seja, o

fluxo de líquido induzirá alterações no estado de tensão do solo, afetando, conseqüentemente, seu comportamento mecânico (Guimarães, 2002).

O fluxo total de líquido através do meio poroso é descrito como a soma de dois fenômenos (Equação 2.12): a lei de Darcy, fluxo de fluido pela ação do gradiente hidráulico e o fluxo acoplado de líquido, ou fluxo osmótico, devido à atuação de um gradiente químico ou osmótico. Estes mecanismos de fluxo estão detalhadamente apresentados nos itens 2.4.1 e 2.4.2 dessa dissertação.

$$\mathbf{q}_l = -\mathbf{K}_l(\nabla P_l - \rho_l \mathbf{g}) + \omega \mathbf{K}_l \nabla \pi \quad (2.12)$$

onde, \mathbf{q}_l é o fluxo de líquido; \mathbf{K}_l é a condutividade hidráulica saturada; P_l é a pressão de líquido; ρ_l é a densidade do líquido; \mathbf{g} é a aceleração da gravidade; ω é a eficiência osmótica e π é a pressão osmótica, dada anteriormente pela Equação 2.5. Analisando a Equação 2.11 se observa que o fluxo osmoticamente induzido depende da condutividade hidráulica do material, do gradiente químico ou osmótico e da eficiência osmótica.

Eficiência osmótica

Entende-se por eficiência osmótica a capacidade ou aptidão de uma argila de se comportar como uma membrana semipermeável perfeita. Quantitativamente, seu valor pode variar 0 e 1, sendo zero quando não se verifica nenhum efeito membrana, ou seja, o soluto passa livremente. Se a eficiência osmótica for igual a um, apenas haverá fluxo de água, sendo a membrana semipermeável dita perfeita, (Barbour & Fredlund, 1989).

Diversos pesquisadores como Kemper e Rollins em 1966, Bresler em 1973, Olsen em 1972, entre outros, têm estudado o efeito da eficiência osmótica em argilas. Os resultados mostram que a eficiência osmótica depende fortemente dos efeitos químicos e da concentração da água dos poros, índice de vazios e espaçamento entre partículas, (Mitchell, 1993). A Figura 2.10 apresenta os resultados obtidos por Bresler (1973) *apud* (Mitchell, 1991).

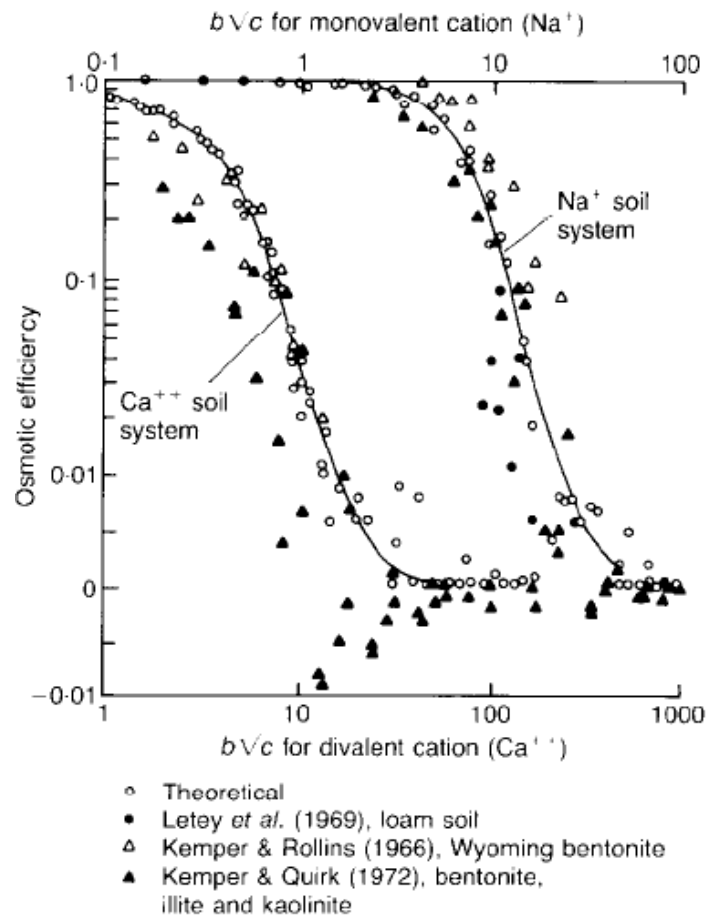


Figura 2.10 – Eficiência osmótica versus $bc^{1/2}$, onde c é a concentração monovalente em normalidade, e $2b$ é o espaço efetivo entre as superfícies das partículas (Bresler, 1973) *apud* (Mitchell, 1991).

Constata-se ainda que a eficiência osmótica desenvolve valores próximos de um preferencialmente em materiais argilosos de baixa porosidade e para concentrações eletrolíticas diluídas (Barbour & Fredlund, 1989; Mitchell, 1993), conforme a Figura 2.11. Isto se dá porque a espessura da dupla camada é quem determina qual são os poros eletrostaticamente livres. Em rochas com poros suficientemente pequenos, as camadas duplas difusas das partículas se sobrepõem e a distribuição de cargas elétricas na solução impede a passagem das espécies iônicas através dos poros. Por outro lado, à medida que a concentração do soluto aumenta, ocorre uma retração na dupla camada, permitindo assim passagem de íons solúveis.

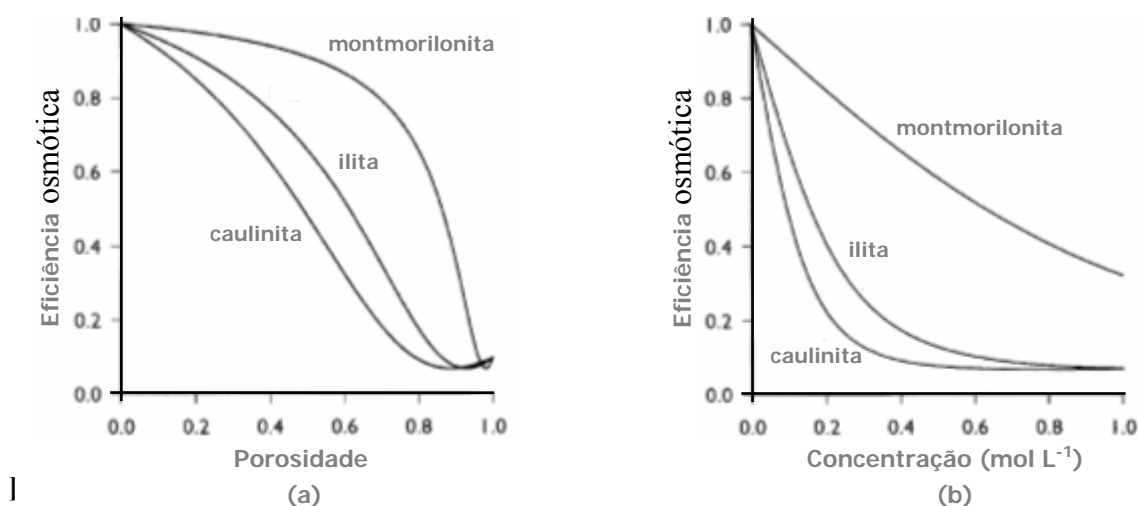


Figura 2.11 – Eficiência osmótica versus porosidade (a) e concentração (b) (Guimarães, 2002).

Os dois tipos de mecanismos de adensamento químico, o osmótico e osmoticamente induzido, podem agir de maneira isolada ou atuarem simultaneamente a depender das circunstâncias e características do solo. Duas grandes áreas da engenharia vêm pesquisando extensivamente sobre este tema: a geotecnia ambiental (principalmente em barreiras de argila para contenção de resíduos) e na engenharia de perfuração de poços de petróleo. A consideração dos efeitos do adensamento químico representa um ganho significativo na compreensão do comportamento mecânico dos solos argilosos. Estudos recentes mostram que suas aplicações de maneira coerente podem representar aumento de estabilidade e segurança as obras geotécnicas.

Os resultados experimentais obtidos por Barbour & Fredlund (1989) e Santamarina & Fam (1995) demonstram que o adensamento osmótico é o mecanismo predominante de mudança de volume de origem química em argilas e misturas de areia e argila. Segundo Michell (1991) o mecanismo de fluxo osmótico, adensamento osmoticamente induzido, apresenta maior importância em argilas altamente sobreadensadas. Frydman & Fontoura (2001) e Garcia (2003) verificaram que o adensamento osmoticamente induzido contribui para estabilidade mecânica durante a perfuração de poços de petróleo.

Essa dissertação visa à reprodução numérica os ensaios edométricos e de compressão isotrópica realizados por Santamarina & Fam (1995) e Fam & Santamarina (1996), os quais são resolvidos como problemas de contorno unidimensionais. Através desses ensaios se

pretende verificar que o modelo proposto é capaz de retratar os mecanismos de consolidação osmótica e de consolidação osmoticamente induzida. Nesse contexto, serão feitas comparações quantitativas e qualitativas entre os ensaios de Santamarina & Fam e os resultados obtidos com a simulação numérica, a fim de se certificar da confiabilidade do código empregado.

Dentro da abrangência do problema, fez-se necessária a introdução de novos parâmetros, que surgiram no desenvolvimento da formulação matemática. Esses parâmetros traduzem o significado físico do problema, e por isso, suas influências e dependências também serão objetos de estudo dessa pesquisa. Isso será alcançado através da análise de sensibilidade dos principais parâmetros empregados na formulação.

CAPÍTULO 3

FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

3.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo serão apresentadas as equações do problema acoplado hidro-mecânico e químico (HMC) estudado nesta dissertação. As equações básicas da formulação são obtidas através da aplicação do princípio de conservação de massa da fase líquida, da fase sólida e de solutos juntamente com a aplicação do equilíbrio de tensões num elemento de solo. Como complemento matemático é necessário a introdução das relações constitutivas do problema HMC, como a lei de Darcy (problema hidráulico), lei de Fick (problema químico) e coeficientes de acoplamento do problema hidro-químico, e as relações tensão-deformação do problema mecânico.

As análises numéricas realizadas nesta dissertação utilizam o código computacional `CODE_BRIGTH`, *COupled DEformation BRIne Gas and HEat Transport*, desenvolvido por Olivella et al. (1995) e complementado por Guimarães (2002) com a introdução do problema químico (transporte reativo). O `CODE_BRIGTH` é um programa de elementos finitos que utiliza o método de Newton-Raphson para resolver os sistemas não lineares resultantes da discretização das equações envolvidas no problema. Esta ferramenta numérica é capaz de resolver problema termo-hidro-mecânico e geoquímico de maneira acoplada em um meio poroso. Neste trabalho será tratado apenas o acoplamento hidro-mecânico e geoquímico.

As equações desenvolvidas neste capítulo consideram o meio poroso saturado, ou seja, com todos os seus vazios preenchidos por líquido. O fluido só poderá se movimentar no meio através dos poros interconectados, uma vez que, os poros isolados não constituem caminhos

de fluxos. Sendo considerado, então, o conceito de porosidade efetiva na formulação, só são quantificados os poros que efetivamente contribuem como caminhos de fluxos.

Será exposta ainda uma breve abordagem sobre os esquemas numéricos de acoplamento entre os problemas termo-hidro-mecânico (THM) e o problema de transporte reativo (geoquímico). O CODE-BRIGHT dispõe de dois esquemas numéricos: o acoplamento forte e o acoplamento fraco.

3.2 FORMULAÇÃO HMC COM FLUXOS OSMÓTICOS E ACOPLAMENTO QUÍMICO- MECÂNICO

Os fluxos considerados na presente formulação encontram-se sombreados na Tabela 3.1. A seguir será apresentada uma generalização da teoria de Peters & Smith (2004), proposta inicialmente para um soluto. Nesta formulação será considerado o transporte multicomponente de espécies químicas e fluxo de água submetidas a efeitos osmóticos em um meio poroso deformável. Por simplicidade, no desenvolvimento das equações considera-se que o meio poroso está saturado, porém a generalização desta formulação para meios não saturados é imediata e não representa nenhuma limitação à teoria. Pela mesma razão, também se considera o problema isotérmico.

Tabela 3.1 – Fluxos diretos e acoplados considerados na presente formulação.

Fluxos	Gradientes			
	Hidráulico	Concentração	Térmico	Elétrico
Fluido	Lei de Darcy	Osiose-química	Termo-osiose	Eletro-osiose
Soluto	Ultrafiltração	Lei de Fick	Efeito Soret	Eletroforese
Calor	Termo-filtração	Efeito Dufour	Lei de Fourier	Efeito Peltier
Carga elétrica	Fluxo de Corrente	Difusão e potencial de membrana	Efeito Seebeck	Lei de Ohm

Inicialmente serão apresentadas as equações do problema hidro-mecânico e de transporte reativo sem a consideração dos efeitos osmóticos de osmose-química e ultrafiltração. Posteriormente, estes fluxos de natureza osmótica serão introduzidos na formulação.

3.2.1 Problema Hidro-mecânico Sem a Consideração do Fluxo Osmótico de Água

A formulação do problema hidro-mecânico considerando o meio poroso saturado vem dada pelas equações de equilíbrio mecânico (3.1) e conservação de massa de água (3.2):

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho_l) + \nabla \cdot \left[\rho_l \mathbf{q}_l + (\phi \rho_l) \dot{\mathbf{u}} \right] = 0 \quad (3.2)$$

onde, $\boldsymbol{\sigma}$ é o tensor de tensões totais; \mathbf{b} é o vetor de forças de corpo; ϕ é a porosidade; ρ_l é a densidade do líquido; \mathbf{q}_l o fluxo volumétrico de água, dado pela Lei de Darcy e $\dot{\mathbf{u}}$ é a velocidade de deslocamento da fase sólida..

A equação de equilíbrio mecânico representa a conservação da quantidade de movimento do meio e pode ser obtida através da soma sobre todas as fases que o compõem. Obteve-se a equação (3.1) considerando o carregamento quasi-estático (termos de inércia desprezados) e a hipótese de pequenas deformações no meio, sem variações micropolares.

Considerando a água incompressível, a lei de Darcy vem dada simplesmente por:

$$\mathbf{q}_l = -\mathbf{k}_l \nabla h_l \quad ; \quad h_l = z + \frac{P_l}{\rho_l \mathbf{g}} \quad (3.3)$$

onde, \mathbf{k}_l é a condutividade hidráulica da água no meio e h_l é a carga hidráulica da água (gravimétrica mais piezométrica). A condutividade hidráulica da água \mathbf{k}_l , geralmente dada em m/s, está relacionada com a permeabilidade intrínseca k_{int} do meio, geralmente dada em m^2 , através da relação:

$$\mathbf{k}_l = \rho_l \mathbf{g} \frac{k_{int}}{\mu_l} \quad (3.4)$$

onde, μ_l é a viscosidade do líquido. Nesta equação observa-se que a condutividade hidráulica k_l depende do fluido (densidade e viscosidade) e do meio poroso através da permeabilidade intrínseca, que por definição não depende do fluido que nele percola.

As variações de porosidade são obtidas a partir da equação de conservação de massa da fase sólida (Olivella et al., 1995):

$$\frac{\partial}{\partial t} [(1 - \phi)\rho_s] + \nabla \cdot [(1 - \phi)\rho_s \mathbf{u}] = f_s \quad (3.5)$$

onde, ρ_s é a densidade da fase sólida; o termo fonte sumidouro f_s que representa a transferência de massa devido às reações heterogêneas entre as fases líquida e sólida e \mathbf{u} é a velocidade de deslocamento da fase sólida.

A partir dessa equação se demonstra que as variações de porosidade do meio devem-se basicamente à transferência de massa entre fases (f_s , principalmente por dissolução e precipitação de minerais) e à deformabilidade do meio poroso ($\nabla \mathbf{u}$). Na presente formulação as variações de porosidade de origem química serão devidas exclusivamente ao acoplamento químico-mecânico a ser descrito mais adiante neste capítulo, que em última instância são variações de porosidade de origem mecânica.

3.2.2 Problema de Transporte de Solutos Sem a Consideração de Ultrafiltração

A equação de transporte de N espécies químicas que são transportadas através do meio poroso e participam das reações químicas são dadas por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_l c_i) + \nabla \cdot \left[\rho_l c_i \mathbf{q}_l - \mathbf{D}_l \nabla c_i + (\phi \rho_l c_i) \dot{\mathbf{u}} \right] = r_i \quad ; \quad i = 1, \dots, N \quad (3.6)$$

onde, c_i é a concentração da espécie i em mols por kg de líquido; r_i é o termo fonte sumidouro devido às reações químicas que a espécie i participa e \mathbf{D}_i é o tensor de dispersão hidrodinâmica, que inclui a dispersão mecânica e a difusão molecular:

$$\mathbf{D}_i = \phi \rho_i \tau D_m \mathbf{I} + \rho_i \mathbf{D}'_i \quad (3.7)$$

onde, τ é a tortuosidade do meio poroso, D_m é o coeficiente de difusão molecular dos solutos, \mathbf{I} é o tensor identidade e \mathbf{D}'_i é o tensor de dispersão mecânica da fase líquida:

$$\mathbf{D}'_i = d_l |\mathbf{q}_l| \mathbf{I} + (d_l - d_t) \frac{\mathbf{q}_l \mathbf{q}_l^t}{|\mathbf{q}_l|} \quad (3.8)$$

sendo, d_l e d_t as dispersividades longitudinal e transversal, respectivamente.

Nas argilas, um processo químico que merece especial atenção é a troca catiônica. O mineral de argila tem carga elétrica negativa em sua superfície e pode absorver cátions e trocá-los com a solução. Essas reações químicas e outras como dissolução/precipitação de minerais, complexação aquosa, ácido base e redox são representadas na equação de transporte (3.6) pelo termo fonte sumidouro r_i . Por simplicidade, nas aplicações apresentadas nessa dissertação se considera que os solutos não participam de reações químicas (transporte conservativo). Detalhes sobre o problema de transporte com reações químicas para a presente formulação podem ser encontrados em Guimarães (2002).

3.2.3 Fluxos Osmóticos nas Equações de Fluxo de Líquido e Transporte de Solutos

Na equação de conservação de água (3.2), o fluxo mássico de água vem dado por:

$$\mathbf{J}_1 = \rho_l \mathbf{q}_1 = -\rho_l \mathbf{k}_1 \nabla h_l \quad (3.9)$$

Deseja-se agora adicionar o fluxo de líquido por osmose-química, que é o fluxo por gradiente de pressão osmótica:

$$\mathbf{q}_1 = -\mathbf{k}_1 \nabla h_l + \omega \mathbf{k}_1 \nabla \pi \quad \Rightarrow \quad \mathbf{J}_1 = -\rho_l \mathbf{k}_1 \nabla h_l + \rho_l \omega \mathbf{k}_1 \nabla \pi \quad (3.10)$$

onde, ω é a eficiência osmótica da argila e π é a pressão osmótica do líquido nos poros.

A pressão osmótica, já definida na seção 2.3.2, é derivada das forças associadas à composição da água do solo, e consiste na diferença de pressão entre regiões de soluções de distintas concentrações de solutos (Fredlund & Rahardjo, 1993).

Sem perda de generalidade e eliminando os efeitos de não idealidade da solução salina (pequenas concentrações), nesta dissertação se adota a seguinte equação simplificada da pressão osmótica para água contendo vários solutos dissolvidos (sistema multicomponente):

$$\pi = RT \sum_{i=1}^N c_i \quad (3.11)$$

onde, R é a constante universal dos gases e T a temperatura.

Por tanto, se escreve o fluxo total de água como:

$$\mathbf{J}_1 = \underbrace{-\rho_l \mathbf{k}_1 \nabla h_l}_{\substack{\text{fluxo mássico de água} \\ \text{devido a Lei de Darcy}}} + \underbrace{\rho_l \omega \mathbf{k}_1 RT \sum_{i=1}^N c_i}_{\text{fluxo osmótico}} \quad (3.12)$$

Por outro lado, o fluxo total do soluto i na equação de transporte (3.6) vem dado por:

$$\mathbf{J}_i = \rho_l c_i \mathbf{q}_1 - \mathbf{D}_1 \nabla c_i = \underbrace{-\rho_l D_m^{eff} \nabla c_i}_{\substack{\text{difusão molecular} \\ \text{Lei de Fick}}} - \underbrace{\rho_l \mathbf{D}'_1 \nabla c_i}_{\substack{\text{dispersão} \\ \text{mecânica}}} + \underbrace{\rho_l c_i \mathbf{q}_1}_{\text{advecção}} = \mathbf{J}_i^d - \underbrace{\rho_l \mathbf{D}'_1 \nabla c_i}_{\substack{\text{dispersão} \\ \text{mecânica}}} + \underbrace{\rho_l c_i \mathbf{q}_1}_{\text{advecção}} \quad (3.13)$$

$$\mathbf{J}_i^d = -\rho_l D_m^{eff} \nabla c_i \quad \rightarrow \quad \text{fluxo difusivo}$$

onde, $D_m^{eff} = \phi \tau D_m$ é o coeficiente de difusão molecular efetivo do meio poroso.

O fluxo de solutos por ultrafiltração é incluído através da teoria de fluxos acoplados de Onsager (1931a,b). Estas relações são baseadas nos coeficientes de acoplamento, L_{ij} , que representam os fluxos simultâneos através do solo. De maneira geral, tanto o fluxo de água como o fluxo de soluto será dado pela ação conjugada do gradiente de pressão de líquido e do gradiente de potencial químico do soluto. Portanto, a partir dessa teoria de fenômenos acoplados, os fluxos de água e solutos são redefinidos como:

$$\mathbf{J}_1 = \underbrace{L_{hh} \nabla(-h_l)}_{\substack{\text{fluxo mássico de água} \\ \text{devido a Lei de Darcy}}} + \underbrace{\sum_{i=1}^N L_{hi} \nabla(-\mu_i)}_{\text{fluxo osmótico}} \quad (3.14)$$

$$\mathbf{J}_i^d = \underbrace{L_{ih} \nabla(-h_l)}_{\text{ultrafiltração}} + \underbrace{L_{ii} \nabla(-\mu_i)}_{\substack{\text{difusão molecular} \\ \text{Lei de Fick}}}$$

Considerando que o potencial químico da espécie i vem dado idealmente (solução diluída - pequenas concentrações) tem-se que:

$$\mu_i = \mu_i^0(T) + RT \ln c_i \Rightarrow \nabla \mu_i = \frac{RT}{c_i} \nabla c_i \quad (3.15)$$

onde, $\mu_i^0(T)$ é o potencial químico da espécie i para o estado padrão.

O potencial químico dos solutos na equação (3.15) é termodinamicamente consistente com a definição de sucção (pressão) osmótica da equação (3.11), e conseqüentemente está de acordo com o cálculo do potencial químico (atividade) da água. Com isto, ao considerar no fluxo de líquido o fluxo acoplado dado pela soma dos gradientes de potencial químico dos solutos (equação 3.14) se recupera o fluxo total de líquido com a componente de pressão osmótica (equação 3.12). Isto só é possível quando se adota no modelo geoquímico potenciais químicos consistentes para os solutos e a água, como no modelo geoquímico para

soluções ideais por simplicidade adotado nesta dissertação (que não significa a perda de generalidade da formulação).

Substituindo o gradiente do potencial químico obtido em (3.15) nos fluxos da equação (3.14) se obtém:

$$\mathbf{J}_1 = \underbrace{-L_{hh}\nabla h_l}_{\text{Lei de Darcy}} - \underbrace{\sum_{i=1}^N L_{hi} \frac{RT}{c_i} \nabla c_i}_{\text{fluxo osmótico}}$$

$$\mathbf{J}_i^d = \underbrace{-L_{ih}\nabla h_l}_{\text{ultrafiltração}} - \underbrace{L_{ii} \frac{RT}{c_i} \nabla c_i}_{\substack{\text{difusão molecular} \\ \text{Lei de Fick}}}$$
(3.16)

e comparando os fluxos da equação (3.16) com os fluxos das equações (3.12) e (3.13) é possível obter o valor dos coeficientes L_{hh} , L_{ii} e L_{hi} :

$$L_{hh} = \rho_l \mathbf{k}_l \quad \left(\text{da Lei de Darcy} \right)$$

$$\frac{RT}{c_i} L_{ii} = \rho_l D_m^{\text{eff}} \Rightarrow L_{ii} = \frac{c_i}{RT} \rho_l D_m^{\text{eff}} \quad \left(\text{da Lei de Fick} \right)$$
(3.17)

$$\frac{RT}{c_i} L_{hi} = \rho_l \omega \mathbf{k}_l RT \Rightarrow L_{hi} = -c_i \rho_l \omega \mathbf{k}_l \quad \left(\text{do fluxo osmótico} \right)$$

Desta forma, é possível agora obter o coeficiente de acoplamento da ultrafiltração (L_{hi}) a partir do coeficiente de acoplamento da osmose-química (L_{ih} , equação 3.17) a partir do princípio de reciprocidade de Onsager(1931a,b):

$$L_{ih} = L_{hi} = -c_i \rho_l \omega \mathbf{k}_l$$
(3.18)

Substituindo este resultado na equação (3.16), que define o fluxo difusivo total do soluto i (difusão molecular + ultrafiltração), chega-se a seguinte equação:

$$\mathbf{J}_i^d = c_i \rho_l \omega \mathbf{k}_1 \nabla h_l - \rho_l D_m^{eff} \nabla c_i \quad (3.19)$$

Portanto, o fluxo mássico total do soluto i , definido anteriormente pela equação (3.13), é obtido substituindo nesta equação o fluxo total difusivo da equação (3.19):

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_i &= \underbrace{\mathbf{J}_i^d}_{\substack{\text{dispersão} \\ \text{mecânica}}} - \underbrace{\rho_l D_l \nabla c_i}_{\text{advecção}} + c_i \mathbf{J}_l \\ \mathbf{J}_i &= \underbrace{c_i \rho_l \omega \mathbf{k}_1 \nabla h_l}_{\text{ultrafiltração}} - \underbrace{\rho_l D_m^{eff} \nabla c_i}_{\substack{\text{difusão molecular} \\ \text{Lei de Fick}}} - \underbrace{\rho_l D_l \nabla c_i}_{\substack{\text{dispersão} \\ \text{mecânica}}} + c_i \mathbf{J}_l \end{aligned} \quad (3.20)$$

Finalmente, substituindo o fluxo mássico de água \mathbf{J}_l , definido pela equação (3.10), no resultado obtido pela equação (3.20), chega-se a:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_i &= \underbrace{c_i \rho_l \omega \mathbf{k}_1 \nabla h_l}_{\text{ultrafiltração}} - \underbrace{\rho_l D_m^{eff} \nabla c_i}_{\substack{\text{difusão molecular} \\ \text{Lei de Fick}}} - \underbrace{\rho_l D_l \nabla c_i}_{\substack{\text{dispersão} \\ \text{mecânica}}} + c_i \underbrace{(-\rho_l \mathbf{k}_1 \nabla h_l + \rho_l \omega \mathbf{k}_1 \nabla \pi)}_{\text{advecção}} \\ \mathbf{J}_i &= -\rho_l D_l \nabla c_i - c_i \rho_l (1 - \omega) \mathbf{k}_1 \nabla h_l + c_i \rho_l \omega \mathbf{k}_1 \nabla \pi \end{aligned} \quad (3.21)$$

onde, \mathbf{D}_l é o tensor de dispersão hidrodinâmica definido anteriormente na equação (3.7), que inclui a dispersão mecânica e a difusão molecular.

Com as equações (3.10) e (3.21), que definem respectivamente os fluxos totais de água e solutos considerando os efeitos osmóticos, a nova formulação acoplada HMC para um meio poroso deformável e saturado fica definida pelas seguintes equações:

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0} \quad (3.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho_l) + \nabla \cdot \left[-\rho_l \mathbf{k}_l \nabla h_l + \rho_l \omega \mathbf{k}_l \nabla \pi + (\phi \rho_l) \dot{\mathbf{u}} \right] = 0 \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi \rho_l c_i) + \nabla \cdot \left(-\rho_l D_l \nabla c_i - c_i \rho_l (1 - \omega) \mathbf{k}_l \nabla h_l + c_i \rho_l \omega \mathbf{k}_l \nabla \pi + \phi \rho_l c_i \dot{\mathbf{u}} \right) = r_i \quad (3.24)$$

$i = 1, \dots, N$

cujas incógnitas são: deslocamentos $\dot{\mathbf{u}}$ para o equilíbrio mecânico (equação 3.22); pressão de líquido P_l para a conservação de massa de água (equação 3.23) e as concentrações c_i dos N solutos nas equações de transporte (3.24). Analisando a Equação 3.24 percebe-se que por simplicidade não se considerou o efeito de retardamento por absorção dos cátions.

O sistema não linear resultante da discretização das equações (3.22) a (3.24) pelo método dos elementos é resolvido através do método de Newton-Raphson implementado no programa computacional CODE_BRIGHT.

Completando a formulação do problema acoplado HMC dessa dissertação, apresenta-se a seguir o modelo constitutivo mecânico que tem como variáveis de estado a pressão osmótica, que é uma variável geoquímica com forte influência no comportamento mecânico de solos quimicamente ativos, como as argilas expansivas.

3.3 MODELO CONSTITUTIVO MECÂNICO

Para a caracterização dos modelos constitutivos mecânicos são necessários se estabelecer relações capazes de reproduzir, com boa aproximação, o comportamento mecânico dos solos submetidos a estado de tensões de interesse. Os modelos constitutivos são baseados fundamentalmente na teoria clássica da elasticidade, da plasticidade e variações destas quando se considera dependência com parâmetros como o tempo, por exemplo.

Nesta dissertação pretende-se considerar o efeito da pressão osmótica no comportamento dos solos argilosos quimicamente ativos de maneira simples e que possibilite reproduzir alguns ensaios onde o comportamento químico-mecânico do solo foi observado de maneira marcante (Santamarina & Fam, 1995; Fam & Santamarina, 1996). Para isso adotou-se neste trabalho o conceito de superfície de estado para o índice de vazios como função da tensão efetiva de Terzaghi e da pressão osmótica da água dos poros (Peters & Smith, 2004). Este modelo elasto-químico foi implementado no programa de elementos finitos CODE_BRIGTH, onde a pressão osmótica em cada ponto é obtida a partir das concentrações dos solutos, incógnitas das equações de transporte.

3.3.1 O Conceito de Tensão Efetiva Verdadeira

O princípio das tensões efetivas foi introduzido por Terzaghi em 1936, representando um grande avanço no entendimento do comportamento de resistência e tensão-deformação dos materiais geotécnicos. Terzaghi estabeleceu que a resistência e deformação dos solos não dependem diretamente da tensão total aplicada, mas da diferença entre a tensão total e a pressão do líquido que satura os poros:

$$\sigma' = \sigma - u \quad (3.25)$$

Entretanto, este princípio não contempla o comportamento deformacional dos solos coesivos e finos, materiais sensíveis a fatores eletro-químicos, quando estes são submetidos a ações químicas que os deformam, como a simples mudança de salinidade da água dos poros (Santamarina, 1996). Para que a influência dos fatores eletro-químicos seja computada no comportamento tensão-deformação dos solos, vários autores lançaram mão de modificações da tensão efetiva de Terzaghi (equação 3.25), originando o conceito de tensão efetiva verdadeira (ou quimicamente modificada). As expressões que descrevem a tensão efetiva verdadeira geralmente são formuladas empregando-se o conceito de pressão ou sucção osmótica.

A tabela 3.2, exposta a seguir, ilustra de maneira resumida a evolução dos modelos propostos por diversos pesquisadores para consideração da tensão efetiva em solos quimicamente ativos.

Tabela 3.2 – Tensões efetivas para solos quimicamente ativos (Fam & Santamarina, 1996).

REFERÊNCIAS	EXPRESSÕES
Solos Coesivos	
Terzaghi (1936)	$\sigma' = \sigma - u$
Skempton (1960)	$\sigma' = \sigma - u \left(1 - a \frac{\tan \psi}{\tan \phi} \right)$
Biot (1941); Skempton (1960); Nur & Byerlee (1971)	$\sigma' = \sigma - u \left(1 - \frac{C_s}{C} \right)$
Solos Finos	
Lambe (1960)	$\sigma' \equiv \sigma - u = \sigma_c + (R_{DL} - Att)$
Bolt (1956)	$\sigma' \equiv \sigma - u = (R_{DL} - Att)$
Sridharan & Rao (1973)	$\sigma' \equiv \sigma_c = \sigma - u - (R_{DL} - Att)$

onde, σ é a tensão total; σ' é a tensão efetiva; σ_c é a pressão intergranular; u é a poro-pressão; R_{DL} é a repulsão da dupla camada; Att é a atração interpartícula; a é a área de contato entre as partículas por unidade de área do material; C_s é compressibilidade volumétrica do material das partículas; C é a compressibilidade volumétrica do solo seco; ϕ é o ângulo de atrito e ψ é o ângulo de atrito intrínseco entre as partículas.

A utilização da tensão efetiva verdadeira geralmente está associada ao conceito da pressão osmótica. Uma vez que, a diferença da pressão osmótica entre o volume de fluido de poros e o do fluido entre as partículas é equivalente à pressão de repulsão eletrostática entre elas (Barbour & Fredlund, 1989). Nesta dissertação será empregado um modelo semelhante ao proposto por Bolt, em 1956, para previsão da tensão efetiva verdadeira. Tendo em vista que há mudanças nas propriedades das argilas através de variações das propriedades químicas dos fluidos dos poros (Santamarina & Fam, 1995).

Desde modo, a tensão efetiva empregada para descrição do modelo constitutivo mecânico será semelhante à tensão efetiva verdadeira, cuja equação está apresentada a seguir.

$$\sigma^* = \sigma - u - (R_{DL} - Att) = \sigma' - (R_{DL} - Att) \quad (3.26)$$

onde, σ^* é a tensão efetiva verdadeira; σ é a tensão total; u é a poro pressão; σ' é a tensão efetiva de Terzaghi; $(R_{DL}-Att)$ é a força de repulsão elétrica de interpartícula subtraída da força de atração elétrica de interpartícula.

3.3.2 Modelo Elasto-químico Adotado

Na formulação, empregou-se o conceito da tensão efetiva quimicamente modificada, onde os efeitos da pressão osmótica são computados diretamente no cálculo da tensão efetiva. A teoria elasto-química adotada parte da consideração de uma superfície de estado para o índice de vazios que depende da tensão efetiva de Terzaghi e da pressão osmótica (Peters & Smith, 2004):

$$e = e(\sigma', \pi) \quad (3.27)$$

onde, e é o índice de vazios do solo; σ' é a tensão efetiva de Terzaghi e π é a pressão osmótica.

Assim, a variação do índice de vazios no tempo pode ser entendida pela Equação 3.28:

$$\frac{\partial e}{\partial t} = \frac{\partial e}{\partial \sigma'} \frac{\partial \sigma'}{\partial t} + \frac{\partial e}{\partial \pi} \frac{\partial \pi}{\partial t} \quad (3.28)$$

Reescrevendo esta equação em termos de variação da porosidade, tem-se:

$$\frac{1}{1-\phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -m_v \frac{\partial \sigma'}{\partial t} - m_\pi \frac{\partial \pi}{\partial t} \quad (3.29)$$

onde, ϕ é a porosidade do solo; m_v é o coeficiente de mudança de volume devido ao carregamento mecânico e m_π é o coeficiente de volume devido ao carregamento geoquímico.

O coeficiente de mudança de volume devido ao processo de adensamento mecânico é dado pela equação a seguir:

$$m_v = -\frac{e}{1+e} \frac{\partial e}{\partial t} = \frac{a_v}{1+e} \quad (3.30)$$

A variável a_v é o coeficiente de compressibilidade do solo.

O coeficiente de mudança de volume devido ao processo de adensamento osmótico é dado pela equação a seguir:

$$m_\pi = -\frac{e}{1+e} \frac{\partial e}{\partial \pi} \quad (3.31)$$

Disto posto, pode-se escrever a tensão efetiva quimicamente modificada em termos da tensão efetiva de Terzaghi e da pressão osmótica (Equação 3.32):

$$\sigma'_\pi = \sigma - u + \zeta\pi \quad (3.32)$$

onde, σ'_π é a tensão efetiva quimicamente modificada; σ é a tensão total; u é a poro pressão; ζ é a relação entre os coeficientes de mudança de volume devido ao carregamento geoquímico e devido ao carregamento mecânico (Equação 3.33) e π é a pressão osmótica.

$$\zeta = \frac{m_\pi}{m_v} \quad (3.33)$$

Para a implementação em programas de elementos finitos, reescrevendo a Equação 3.32 em termos tensoriais obtêm-se:

$$\underline{\underline{\sigma}}_s' = \underline{\underline{\sigma}} - u\underline{\underline{I}} + \zeta\underline{\underline{\pi}}\underline{\underline{I}} \quad (3.34)$$

Desta forma as ações químicas afetam exclusivamente a parte volumétrica do comportamento dos solo, onde a tensão que deforma o solo é $\underline{\underline{\sigma}}_s' = \underline{\underline{D}}\underline{\underline{\varepsilon}}$, sendo $\underline{\underline{D}}$ a matriz elástica e $\underline{\underline{\varepsilon}}$ o tensor de deformações.

3.3.3 Lei Cinética para a Variável de Estado Química

Para reproduzir os ensaios de adensamento químico de Santamarina e Fam descritos no próximo capítulo, foi necessário introduzir o efeito do tempo no modelo constitutivo químico-mecânico. O efeito do tempo foi observado quando rápidas imposições de ações químicas causam lentos efeitos mecânicos (deformações) no solo. Este retardamento químico pode ser justificado, pelo menos do ponto de vista conceitual, pela idéia de que as argilas são materiais de dupla estrutura (com macro e microestruturas) e que a natureza química de seu comportamento vem dada principalmente pela microestrutura (sendo lá onde ocorrem os fenômenos físico-químicos).

Sendo assim, definem-se duas variáveis de estado químicas para o comportamento químico-mecânico da argila: pressão osmótica microestrutural (π_m) e pressão osmótica macroestrutural (π_M). A pressão osmótica microestrutural é a responsável pelas deformações de origem química do solo, já que é na microestrutura onde predominam os fenômenos físico-químicos entre partículas de argila carregadas negativamente e a água ionizada dos poros. Portanto, levando em consideração a hipótese de concentrar todo efeito químico na microestrutura, a equação (3.32) para a tensão efetiva quimicamente modificada deve ser reescrita em função exclusivamente da pressão osmótica da microestrutura:

$$\sigma'_\pi = \sigma - u + \zeta\pi_m \quad (3.35)$$

Por outro lado, considerando que os solutos são transportados pelos macroporos, a pressão osmótica que é função direta das concentrações dos solutos (equação 3.11) é a pressão osmótica da macroestrutura:

$$\pi_M = RT \sum_{i=1}^N c_i \quad (3.36)$$

Em condições de equilíbrio local, as pressões osmóticas macro e microestruturais se igualam ($\pi_M = \pi_m$) e o efeito de material de dupla estrutura desaparece, recuperando-se o modelo dado pela equação (3.32) para materiais de simples estrutura.

Para introduzir o efeito do tempo e relacionar as pressões osmóticas macro e microestruturais estabelece-se que estas estão relacionadas por uma lei cinética de primeira ordem:

$$\frac{d\pi_m}{dt} = \beta \cdot [\pi_M - \pi_m] \quad (3.37)$$

onde, β é a constante cinética. A influência das respostas do modelo com a introdução da lei cinética (3.36) será discutida no Capítulo 4 dessa dissertação.

A equação (3.37) demonstra com clareza o retardamento estabelecido para o comportamento da microestrutura em relação ao da macroestrutura. Pode-se perceber ainda que, mantendo-se π_M constante, a diferença entre as variáveis dos dois níveis estruturais tende a zero no infinito.

Ao expor uma argila expansiva a uma solução salina, Di Maio (1996) observou a diferença de velocidades de deformação nos ensaios de adensamento mecânico (edométrico convencional) e químico (edométrico com exposição a solução salina). Nestes ensaios, Di Maio constatou que o adensamento mecânico (provocado pela aplicação de carga) é mais rápido que o adensamento osmótico (ocasionado por mudança de concentração salina), conforme pode ser visto na Figura 3.1a. Este fenômeno também foi verificado quando se comparou a razão de umedecimento entre os dois processos de adensamento (Figura 3.1b).

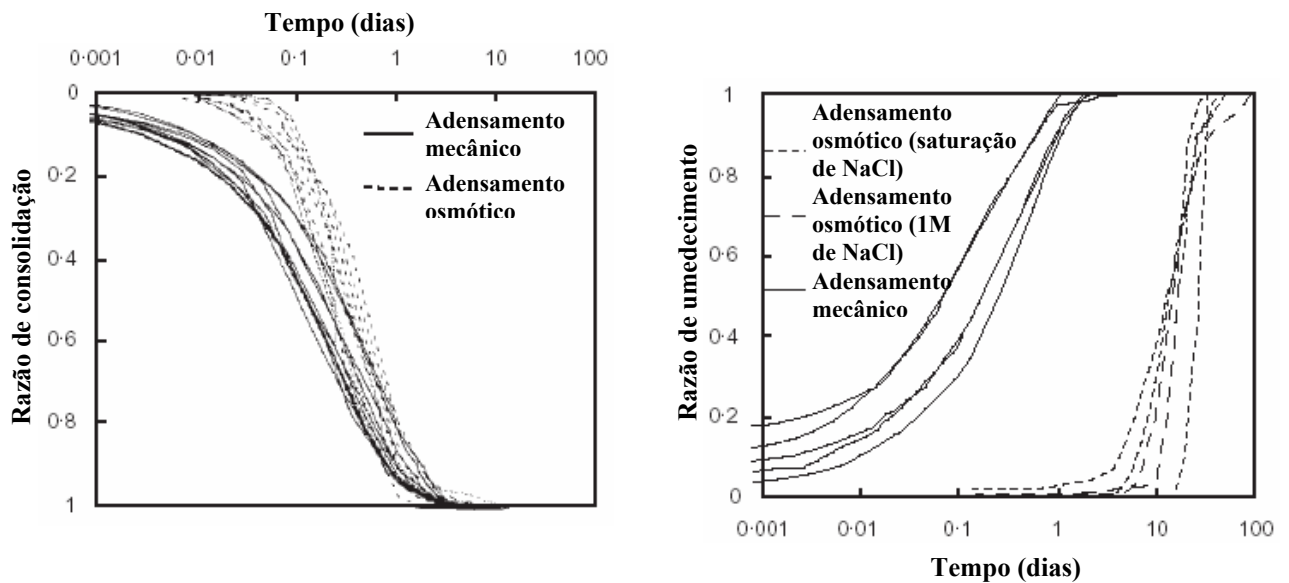


Figura 3.1 – Comparação dos efeitos mecânicos e osmóticos em argilas expansivas expostas à solução salina. (a) – processo de mudança de volume. (b) – processo de umedecimento Di Maio (1996).

No adensamento químico há três mecanismos que controlam a velocidade de deformação da argila: a velocidade com que os solutos se difundem através da amostra (equivalente à velocidade de aplicação de carga no edométrico convencional), a permeabilidade do solo (que controla a velocidade com que a água saia da amostra) e a transferência de água entre macro e micro estruturas. A lei cinética introduzida pela equação (3.37) diz respeito a este último mecanismo e o parâmetro β é quem controla sua velocidade. O processo físico-químico de transferência de água entre níveis estruturais está relacionado com a absorção de água na superfície eletricamente negativa das partículas de argila, que depende primordialmente dos fatores associados à dupla camada.

Tendo em vista que a permeabilidade do meio é a mesma nos dois ensaios (adensamento químico e mecânico) e que o processo de difusão de solutos no solo é rápido, o mecanismo que melhor explicaria este retardamento do adensamento químico em relação ao mecânico seria o representado matematicamente pela equação (3.37).

O modelo químico-mecânico aqui formulado considera equilíbrio local para as variáveis mecânicas e hidráulicas do problema, ou seja, a pressão de líquido e a tensão são iguais para os dois níveis estruturais. Entretanto, para as variáveis de estado responsáveis pelas ações químicas, se introduziu a lei cinética (3.37) que considera que existe um desequilíbrio entre o potencial químico das águas micro e macroestruturais (representados aqui por suas pressões osmóticas), originando uma lenta transferência de água entre os dois níveis.

3.4 ESQUEMA NUMÉRICO DOS PROBLEMAS DE ACOPLAMENTO TERMO-HIDRO-MECÂNICO E QUÍMICO

A resolução do problema acoplado THMC consiste em determinar, para cada passo de tempo, a solução do sistema não linear de equações: as equações do problema THM e as equações do transporte reativo. O acoplamento entre os problemas pode se dá através de distintos níveis e dependências, resultando em diferentes maneiras de resolução do conjunto. As implementações realizadas por Guimarães (2002) no código CODE_BRIGTH consideram dois tipos possíveis de acoplamento entre elas: o acoplamento forte e o fraco. Nesta dissertação, tratará apenas do problema HMC, ou seja, não será resolvida a equação de calor.

O acoplamento fraco se refere ao caso em que a influência das concentrações químicas no problema THM é secundária. Já o acoplamento forte é recomendado para situações em que esta influência é significativa. Segundo Cheng & Yeh (1998) o acoplamento forte deverá ser empregado para as fases transientes da simulação enquanto o acoplamento fraco poderá ser utilizado na fase estacionária. Isto se explica pelo fato de que em problemas estacionários a

solução inicial pode estar muito longe da solução final e por isto o problema exige um método de solução mais robusto.

Quando a concentração das espécies químicas tem menor influência nas variáveis do problema THM (acoplamento fraco) a solução numérica é obtida através do esquema da Figura 3.2.

Na Figura 3.2, os termos \mathbf{X}_{new} e \mathbf{X}_{old} correspondem aos vetores das incógnitas do problema THM no final e no início do incremento de tempo, respectivamente. \mathbf{U}_{new} e \mathbf{U}_{old} são os vetores das concentrações totais no final e início do incremento de tempo. Os índices i dos termos \mathbf{X}_{new} e \mathbf{U}_{new} se referem às iterações de Newton-Raphson. \mathbf{J}_{THM} e \mathbf{J}_{CHE} são os respectivos jacobianos dos problemas THM e de transporte reativo. \mathbf{R}_{THM} e \mathbf{R}_{CHE} correspondem aos resíduos das equações de balanço destes problemas. E por fim, $\partial\mathbf{X}$ e $\partial\mathbf{U}$ são as correções do Método de Newton-Raphson para os problemas THM e de transporte reativo.

Analisando o esquema numérico do acoplamento fraco, Figura 3.2, se percebe que primeiro é resolvido o problema THM. Uma vez encontrada a solução deste problema, ou seja, obtidas as distribuições de umidade e temperatura, os fluxos das fases fluidas e as deformações do meio, se resolve o problema químico. Se as concentrações das espécies não influenciarem o THM, se passará, então, para o incremento de tempo seguinte. Quando se estabelece algum tipo de dependência das variáveis THM com as variáveis químicas, aquelas devem ser atualizadas devido à mudança das variáveis químicas. Assim sendo, novas iterações serão necessárias até que se alcance a convergência entre os problemas THM e de transporte reativo. O próximo incremento de tempo só será ativado quando esta convergência for atingida (Guimarães, 2002).

Quando o problema de transporte reativo influencia significativamente o problema THM diz-se que existe um forte acoplamento entre eles. Neste caso, as concentrações das espécies químicas determinarão mudanças nas variáveis dos problemas THM. O esquema numérico proposto utilizado pelo CODE_BRIGTH para este tipo de situação está apresentado na Figura 3.3 adiante exposta.

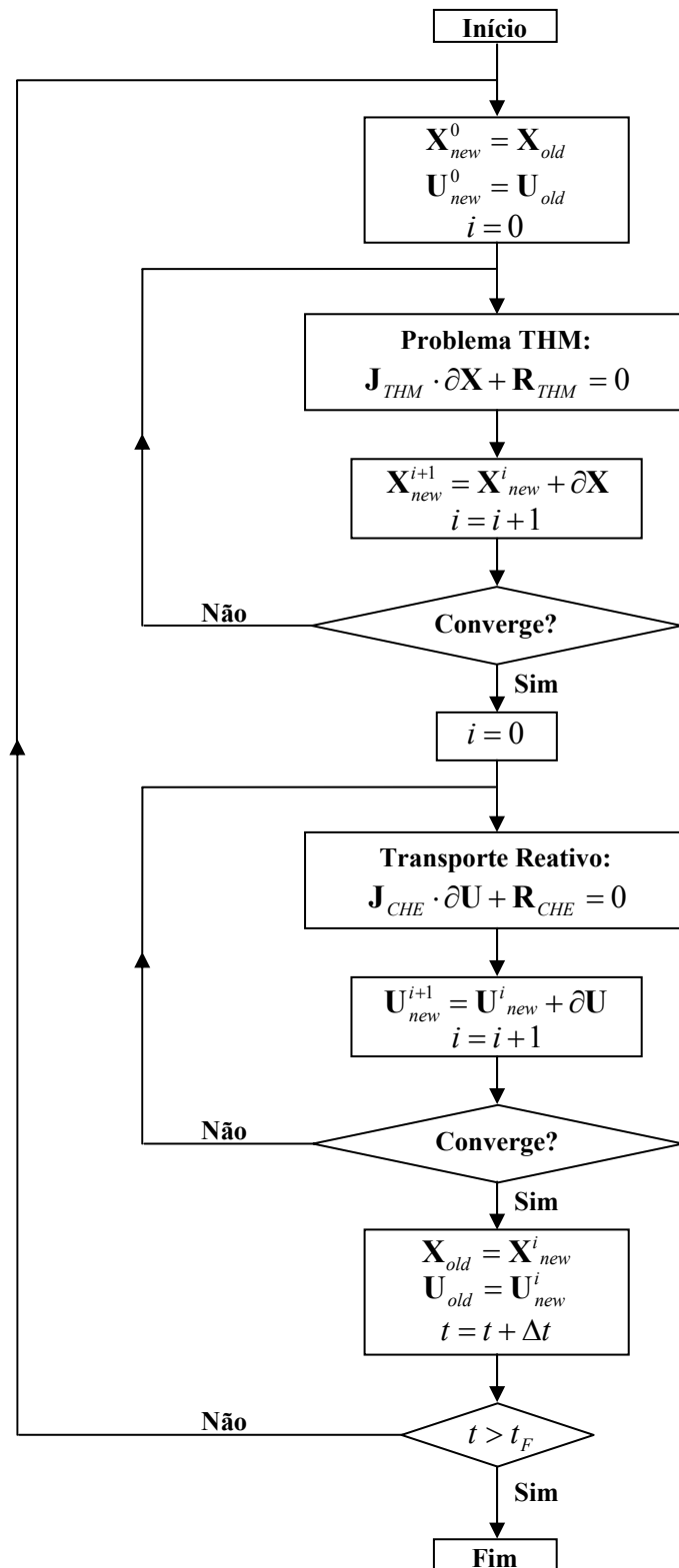


Figura 3.2 – acoplamento fraco no CODE_BRIGHT (Guimarães, 2002).

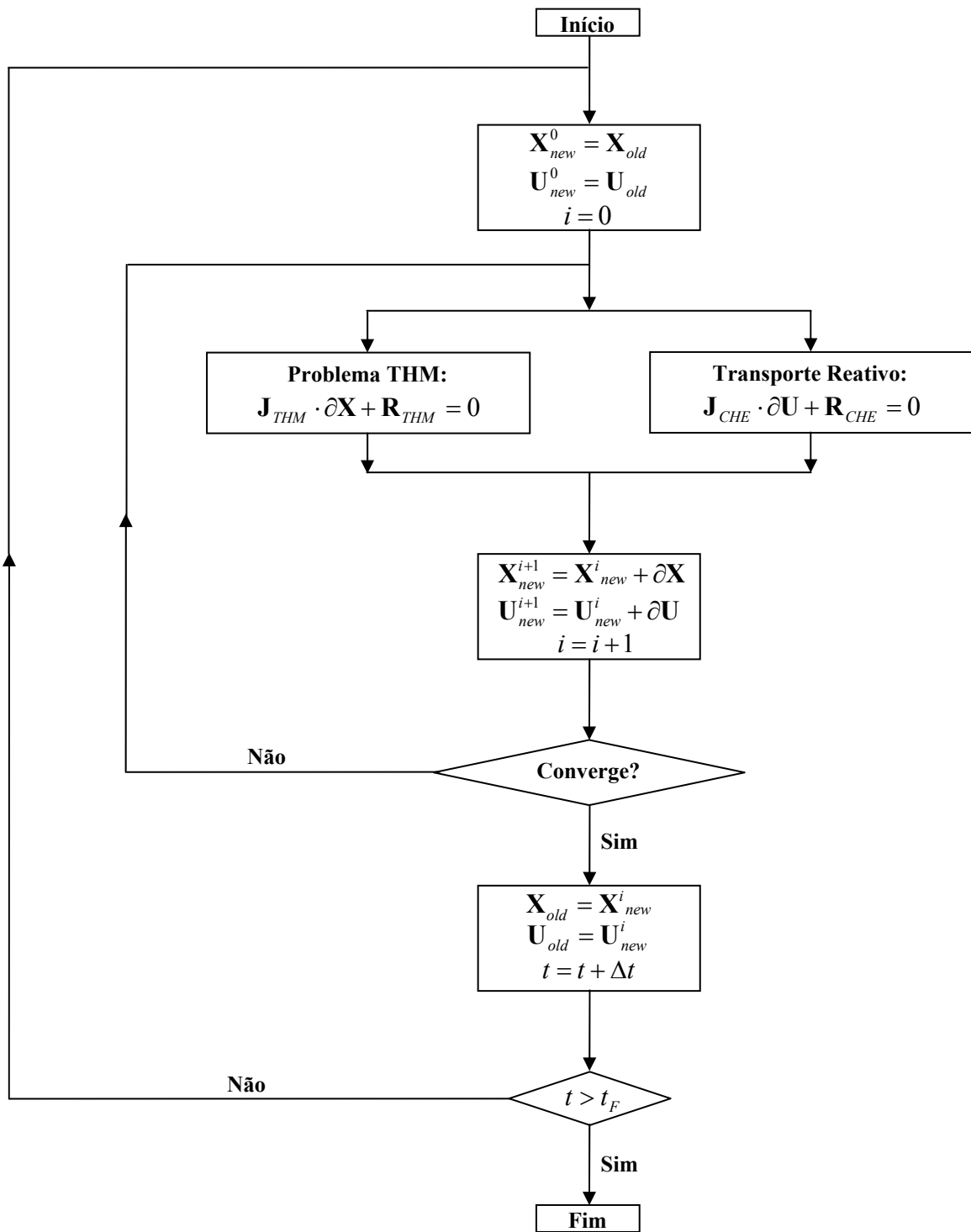


Figura 3.3 – acoplamento forte no CODE_BRIGHT (Guimarães, 2002).

Analisando o esquema numérico da Figura 3.3 se verifica a diferença entre o acoplamento forte e o fraco. No acoplamento forte se resolvem mutuamente em um único laço de iterações

os problemas THM e o problema de transporte reativo. Deste modo, só se passará ao incremento de tempo seguinte quando ambos os problemas convergirem. O acoplamento forte apesar de exigir maior esforço computacional quando comparado com o fraco, vem se mostrando bastante eficiente em suas aplicações (Guimarães, 2002).

CAPÍTULO 4

ANÁLISE DOS RESULTADOS

4.1 INTRODUÇÃO

O objetivo desse capítulo é reproduzir os ensaios de Santamarina & Fam (1995) e assim validar o modelo acoplado hidro-mecânico e geoquímico para meios porosos de granulometria fina (argilas) proposto no capítulo anterior. A modelagem numérica deverá reproduzir qualitativa e quantitativamente o comportamento da argila estudada por Santamarina & Fam em seus experimentos, onde as amostras foram submetidas simultaneamente a carregamentos químicos e mecânicos.

A metodologia utilizada por Santamarina & Fam (1995) para realização do ensaio edométrico modificado e de compressão isotrópica, assim como as propriedades do material ensaiado, serão descritas em detalhes neste capítulo. Também serão detalhadas as condições de contorno e iniciais aplicadas na modelagem numérica.

A apresentação dos resultados será realizada em duas etapas. Inicialmente os parâmetros do modelo serão ajustados com base no ensaio edométrico modificado onde a amostra é exposta a uma solução salina altamente concentrada de KCl. Ainda nesta etapa, será feita a validação do código numérico e parâmetros obtidos da modelagem anterior reproduzindo-se o ensaio de compressão isotrópica (em equipamento triaxial) realizado por Santamarina & Fam neste mesmo material, com a amostra exposta à mesma solução salina de KCl.

No ensaio edométrico modificado as principais saídas a serem ajustadas são a evolução da deformação vertical e a pressão de líquido medida na base da amostra. No ensaio de

compressão isotrópica utilizou-se o modelo para reproduzir principalmente o volume de água expelido pela amostra ao longo do tempo e sua deformação vertical. Essas respostas hidro-mecânicas observadas em ambos os ensaios devem-se exclusivamente à exposição da amostra de argila saturada à solução salina de KCl.

Na etapa seguinte, analisar-se-á a sensibilidade do comportamento hidro-mecânico e geoquímico do solo estudado aos parâmetros de acoplamento introduzidos no código numérico. Será também analisada a influência da permeabilidade intrínseca do meio, parâmetro chave que controla o comportamento acoplado do sistema solo-água-solutos. A análise de sensibilidade será a ferramenta utilizada para a compreensão refinada do problema e constatação da influência de cada parâmetro. Bem como, será a técnica de forte poder indicativo do caminho mais apropriado para alteração dos parâmetros na busca do melhor ajuste entre as curvas teóricas (numéricas) e experimentais.

4.2 ENSAIOS DE SANTAMARINA & FAM

Santamarina & Fam (1995) realizaram dois programas experimentais com a finalidade de pesquisar o comportamento mecânico e os efeitos das forças de natureza físico-química dos solos finos quando expostos à soluções salinas. Nessa ocasião foram utilizados os ensaios edométrico modificado e de compressão isotrópica. Três tipos de solos foram analisados: o pó de sílica, relativamente granular que apresenta comportamento não plástico; a caolinita, de granulometria intermediária; e a bentonita, de granulometria muito fina, natureza coloidal e comportamento plástico.

A metodologia utilizada nos ensaios compreendeu duas fases distintas, na primeira fase, a amostra foi submetida ao adensamento mecânico, após essa etapa a amostra foi exposta a uma solução concentrada de KCl.

Analisando os resultados, constatou-se, como esperado, que a bentonita foi o material que apresentou maior sensibilidade à exposição ao sal dentre os três solos considerados, verificando-se principalmente as maiores deformações. Não se observou na amostra de pó de

sílica deformações quimicamente induzidas. A partir dos resultados do ensaio edométrico se verificou que a caolinita se comportou de maneira semelhante à bentonita, apesar de se deformar menos e gerar pressão de poros menores. Fam & Santamarina (1996) justificam tal resultado pelo fato das partículas de caolinita apresentarem um comportamento coloidal de fraco a moderado. Isto faz com que nem sempre a caolinita tenha seu comportamento explicado pela teoria da dupla camada.

Nas análises iniciais de seus experimentos, Santamarina & Fam (1995) e Fam & Santamarina (1996) constataram apenas o efeito do adensamento osmótico através da observação da geração de pressão de poros positivas durante a realização do ensaio. Em estudos posteriores e mais cuidadosos sobre esses experimentos, Santamarina (2006) conseguiu detectar também o efeito do adensamento osmoticamente induzido, uma vez que pôde comprovar a ocorrência de pressão de poros negativa na amostra.

Nessa dissertação será simulado numericamente o ensaio edométrico modificado de Santamarina & Fam (1995) para a amostra de bentonita, a fim de validar quantitativa e qualitativamente o modelo numérico. Com esse experimento se conseguiu obter de forma contínua dados sobre a pressão de poros e deformação vertical da amostra, fundamentais para entendimento dos fenômenos estudados. Além do mais, a bentonita é o material dentre os três ensaiados que mais se adequa à teoria da camada dupla, respondendo mais ativamente à exposição de soluções salinas.

O ensaio de compressão isotrópica de Santamarina & Fam (1995) será modelado para validar o modelo numérico com parâmetros ajustados a partir do ensaio edométrico modificado. Os resultados das modelagens numéricas desse ensaio serão comparados com os resultados experimentais de Santamarina & Fam (1995) e Fam & Santamarina (1996) onde nenhum ajuste de parâmetros para este ensaio em particular será feito. Os resultados a serem comparados nesse caso será o volume de água expelido nas faces superior e inferior da amostra e a deformação vertical.

Os próximos tópicos tratarão da metodologia do ensaio edométrico modificado realizado por Santamarina & Fam, bem como, a caracterização geotécnica da bentonita empregada. Maiores detalhes sobre esse experimento podem ser encontrados em Santamarina & Fam (1995) e Fam & Santamarina (1996).

4.2.1 Descrição do Ensaio Edométrico Modificado de Santamarina & Fam

Santamarina & Fam (1995) construíram uma célula edométrica com drenagem unicamente na face superior da amostra. Na face inferior da amostra foi instalado um transdutor de pressões que permitiu a leitura contínua de pressões de poros. Numa primeira etapa do ensaio com bentonita, o solo foi adensado primariamente através da aplicação de uma carga de 100KPa. Adicionalmente, após a adensamento mecânico, a amostra foi exposta continuamente a uma solução concentrada de 4,0M de KCl.

Tanto o carregamento mecânico quanto o químico foram aplicados apenas na face superior da amostra. A face inferior é considerada impermeável para os problemas hidráulico e químico e teve seu deslocamento vertical restringido. O esquema do equipamento utilizado pode ser conferido na Figura 4.1. As amostras foram preparadas utilizando a técnica de adensamento para suspensões (*slurry*).

A célula edométrica idealizada por Santamarina & Fam permite a medida contínua da pressão de poros na face inferior da amostra, da velocidade das ondas de cisalhamento, bem como a constante dielétrica durante a fase de exposição da amostra à solução de concentração salina. As respostas experimentais aproveitadas nas análises discutidas nesse trabalho são as evoluções com o tempo da pressão de poros e deformação vertical da amostra.

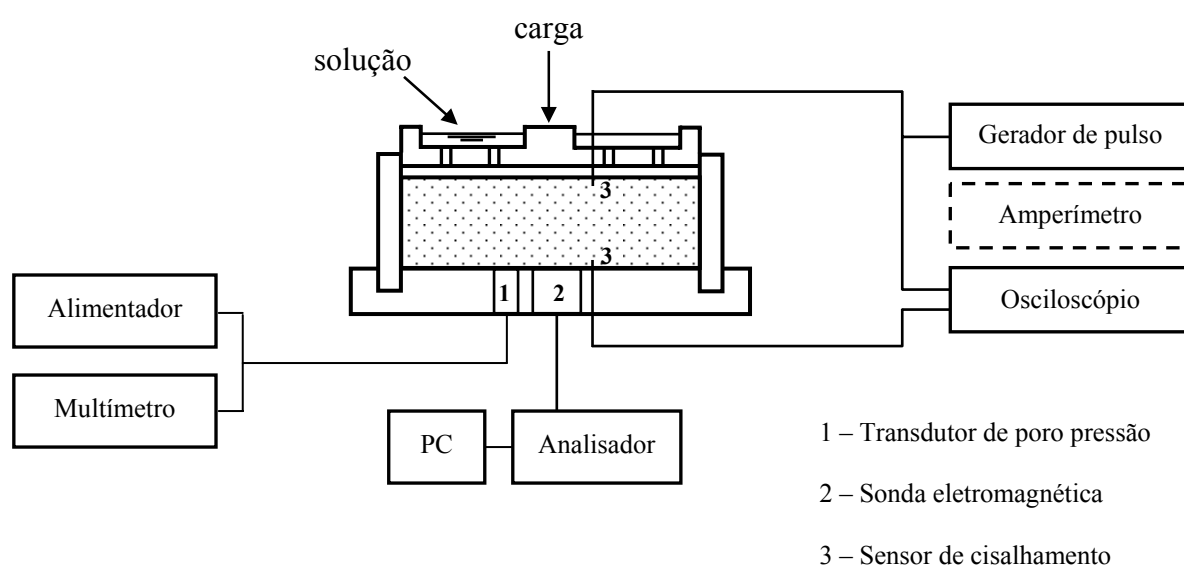


Figura 4.1 – Esquema da célula edométrica modificada (Santamarina & Fam, 1995).

4.2.2 Caracterização da Bentonita Utilizada por Santamarina & Fam

A bentonita ensaiada por Santamarina & Fam (1995) diz respeito às argilas encontradas na região de Saskatchewan no Canadá. A bentonita utilizada no ensaio é tida como uma montmorilonita sódica expansiva, ou seja, o principal cátion trocável absorvido nas partículas de argila são os cátions de sódios. A bentonita é um material bastante fino, fato este que evidencia suas propriedades físico-químicas tais como: elevada superfície específica, alta capacidade de troca de cátions e fenômenos relacionados à teoria da dupla camada.

Na tabela 4.1 estão listados as propriedades físico-químicas e de engenharia fornecidas por Santamarina & Fam. Tendo em vista que, não se encontram disponíveis na literatura todas as informações necessárias para a completa modelagem hidro-mecânica e geoquímica do problema, foram realizados ajustes numéricos de parâmetros para satisfazer os resultados experimentais. Estes dados complementares estão expostos na seção 4.2.3 da simulação numérica.

Tabela 4.1 – Caracterização da bentonita testada por Santamarina & Fam.

PROPRIEDADES DA BENTONITA	
Gravidade específica	2.55
Superfície específica (m ² /g)	400
Limite de liquidez (%)	250
Limite de plasticidade (%)	50
Capacidade de troca catódica (mequiv./100 g)	80 - 85
pH	9.0

Após a preparação da amostra de bentonita o índice de vazios resultante foi de 4.6.

4.2.3 Simulação Numérica do Ensaio Edométrico Modificado

O objetivo principal da modelagem é a compreensão dos fenômenos envolvidos no problema acoplado hidro-mecânico e geoquímico, identificando os mecanismos e parâmetros relevantes do problema. Os mecanismos a serem considerados nesta análise são: difusão do soluto

através da amostra, deformação e fluxo de líquido quimicamente induzidos, geração e dissipação de pressão de poros.

A simulação numérica obedeceu às mesmas condições iniciais e condições de contorno impostas por Santamarina & Fam (1995) e Fam & Santamarina (1996) no experimento. Foram mantidas as mesmas seqüências das ações de carregamento mecânico e químico do experimento durante toda a modelagem deste ensaio.

Para a reprodução do ensaio edométrico de Santamarina & Fam utilizou-se uma malha de elementos finitos unidimensional de 20mm (altura da amostra), contendo 21 nós e 20 elementos lineares.

As condições de contorno aplicadas para a fase de exposição à solução salina são diferenciadas para cada face da amostra. Portanto, para a face superior, a condição de contorno do problema mecânico é uma carga constante de 100KPa, a condição do problema hidráulico é uma pressão de líquido de 0,0025MPa (relativa à atmosférica) e para o problema de transporte de soluto se impõem as concentradas da solução de KCl. Por outro lado, para a camada inferior, se considera o contorno como impermeável para os problemas hidráulicos e de transporte de soluto, já para o problema mecânico se restringe o deslocamento vertical da amostra.

Como condições iniciais do problema considera que o solo se encontra inicialmente a concentrações diluídas de KCl (na prática, zero) e a uma pressão de líquido inicial de 0,0025MPa. O estado de tensões inicial é uma carga de 100KPa aplicada na face superior da amostra compatível com a situação real de ensaio.

Os parâmetros adotados na modelagem numérica foram obtidos através da publicação de Santamarina & Fam (1995), presentes na tabela 4.1. Entretanto, como nem todos os dados necessários à simulação foram disponibilizados, se ajustou numericamente os demais parâmetros com base em referências bibliográficas sobre o assunto, Kaczmarek (2001), Kaczmarek & Hueckel (1998) e Peters & Smith (2004), a fim de reproduzir satisfatoriamente o ensaio edométrico de Santamarina & Fam para a bentonita. Esses parâmetros podem ser encontrados na tabela 4.2.

4.2.4 Resultados Numéricos do Ensaio Edométrico Modificado

Ao expor a amostra de bentonita a uma solução salina de KCl Santamarina & Fam observaram que a mesma se deformou verticalmente ao longo do tempo conforme pode ser visto na Figura 4.2. Inicialmente a amostra deforma-se rapidamente e para tempos maiores a velocidade de deformação vai diminuindo até aparentemente tender a zero. A deformação vertical da amostra de bentonita exposta a uma solução concentrada de 4,0M de KCl foi de aproximadamente 20%, sendo que apenas 8% da deformação medida após a difusão podem ser justificadas pelo adensamento secundário (Santamarina & Fam, 1995). Conforme pode ser visto nesta figura, conseguiu-se um excelente ajuste dos resultados de modelo aos medidos no experimento.

Um outro resultado de grande relevância para reprodução do ensaio é a evolução das pressões de poro na face inferior da amostra, mostrada na Figura 4.3. Observa-se nesse ensaio que inicialmente há um pulso negativo de pressões de poros seguido de um pulso positivo de amplitude muito maior. O final do pulso positivo de pressões da Figura 4.3 coincide com o tempo de estabilização das deformações verticais da Figura 4.2. Mais uma vez pode-se constatar que o modelo foi capaz de reproduzir de maneira bastante satisfatória os pulsos negativo e positivo de pressões de poros medidos no ensaio.

Tabela 4.2 – Parâmetros utilizados na simulação numérica.

DESCRIÇÃO DOS PARÂMETROS	SÍMBOLO	VALOR	UNIDADE
Permeabilidade intrínseca	k	9,70E-19	m ²
Módulo de elasticidade de Young	E	10	Mpa
Tortuosidade	τ	1	Ad.
Coefficiente de difusão molecular	D_m	7,60E-10	m ² /s
Capacidade de troca catódica	CTC	80	meq/100g
Eficiência osmótica	ω	0,00045	Ad.
Razão entre os coef. volumétricos geoquímico e mecânico	ζ	0,00972	Ad.
Constante cinética	β	7,00E-06	Ad.

O predomínio da geração de pressão de poros positiva está associada à resposta não drenada do solo à tendência de retração química. Este fenômeno refere-se ao transporte de sal por difusão molecular, o qual altera as interações eletrostáticas entre as partículas de argila. Como conseqüência, observa-se a redução na espessura da dupla camada e diminuição do índice de vazios do solo da amostra.

Utilizando a nomenclatura de Barbour & Fredlund (1989), o pulso de pressões positivas está associado ao mecanismo de *adensamento osmótico* enquanto o pulso de pressões negativas está associado ao *adensamento osmoticamente induzido*.

No *adensamento osmoticamente induzido*, o gradiente osmótico entre a solução salina colocada no reservatório em contato com a face superior da amostra e a solução diluída dos poros da amostra gera um fluxo osmótico de líquido dado pela equação (3.10) descrita no Capítulo 3. Por tratar-se de um meio de baixa permeabilidade e, portanto, impedindo o líquido de sair rapidamente da amostra, a única maneira que o solo encontra para contrapor a tendência de saída do líquido da amostra por diferença de pressão osmótica é gerar nos seus poros pressões hidráulicas negativas. A pressão de líquido negativa resulta num aumento de tensão efetiva (equação 3.34 do Capítulo 3), causando um efeito de compressão e conseqüente diminuição de volume do solo. À medida que os solutos se difundem pela amostra, este gradiente de pressões osmóticas vai sendo dissipado e conseqüentemente as pressões hidráulicas negativas também.

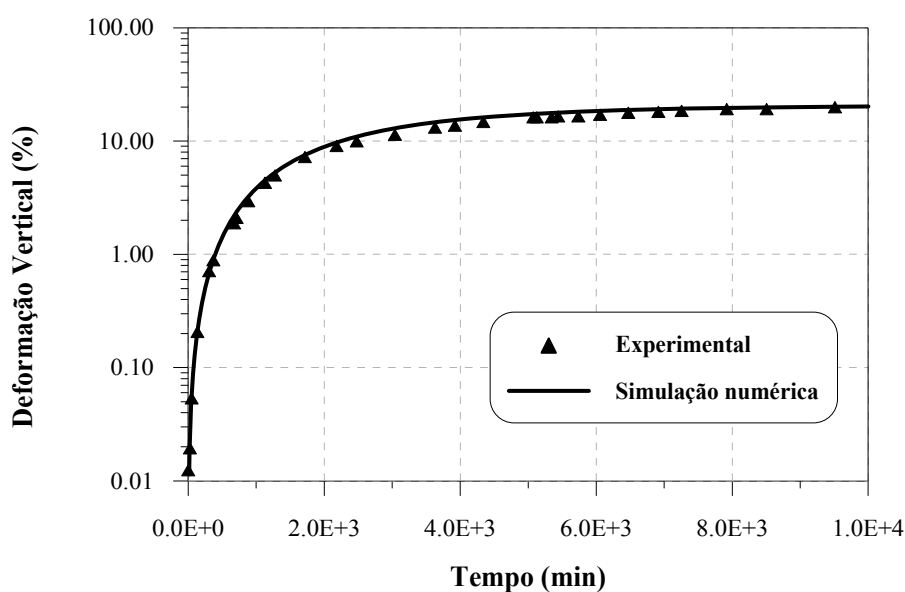


Figura 4.2 – Deformação vertical medida e calculada na amostra submetida a uma solução à 4,0M de KCl.

Já no adensamento osmótico, à medida que a solução salina se difunde pela amostra, a pressão osmótica do líquido nos macroporos (π_M) tende a aumentar. De acordo com o modelo constitutivo do modelo químico-mecânico (equações 3.34 a 3.36) descrito no Capítulo 3, a pressão osmótica microestrutural (π_m) e a tensão efetiva quimicamente modificada devem aumentar e conseqüentemente o solo sofrerá uma tendência à compressão. Novamente, como se trata de um material de baixa permeabilidade, esta tendência à compressão tem como efeito não drenado a geração de poros-pressão positivas na amostra. Com o tempo essas pressões de poros vão sendo dissipadas (à medida que a água é expulsa pela face superior) e a amostra sofre deformações.

Do ponto de vista do modelo proposto, ambos os mecanismos de adensamento (osmótico e osmoticamente induzido) causam a tendência de redução de volume do solo. A exposição da bentonita a uma solução concentrada de KCl acarretará num aumento de pressão osmótica no solo que leva a amostra a expelir a água de seus poros pela face de contato com a solução salina. A água dos poros pode ser expelida pelo fluxo gerado pelo gradiente de pressão osmótica (adensamento osmoticamente induzido) ou para dissipar as pressões hidráulicas positivas geradas como resposta não drenada à tendência de compressão quimicamente induzida (adensamento osmótico). Visto que o pulso positivo na pressão de líquido é bem superior ao pulso negativo, conclui-se que o mecanismo de mudança de volume preponderante é o adensamento osmótico.

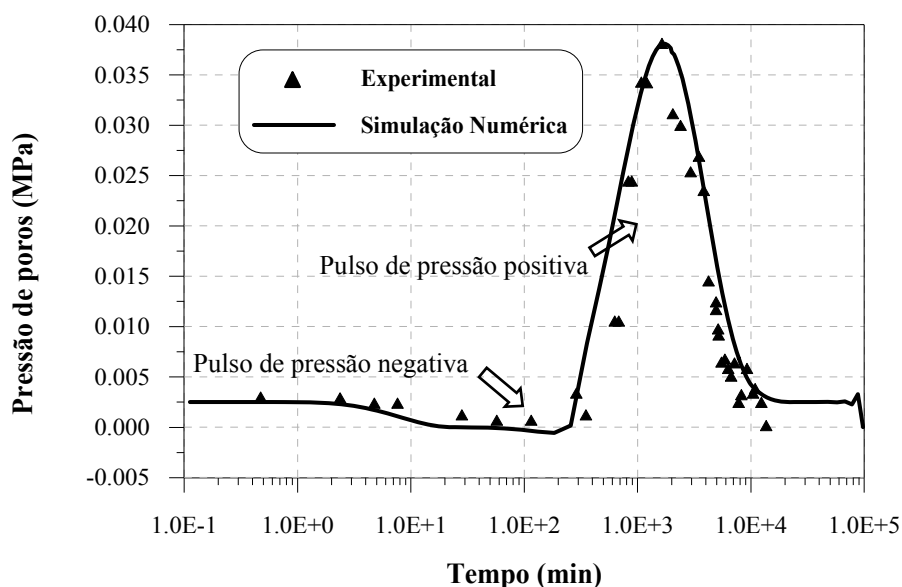


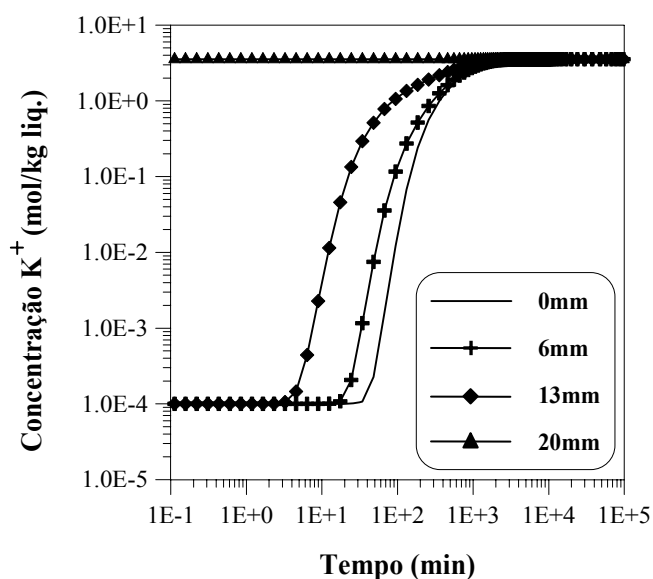
Figura 4.3 – Pressão de poros medida e calculada na camada inferior da amostra.

Pode-se dizer ainda que a geração de pressão de poros positiva maior que a negativa ocorre porque os sais se difundem na amostra mais rapidamente que as pressões de poros se dissipam. O transporte de sais dissolvidos na amostra, cujo parâmetro dominante é o coeficiente de difusão molecular, prepondera sobre o fluxo de líquido. O transporte de líquido é responsável pela dissipação da pressão de poros, tendo como parâmetro fundamental a permeabilidade, que para os solos argilosos é muito baixa.

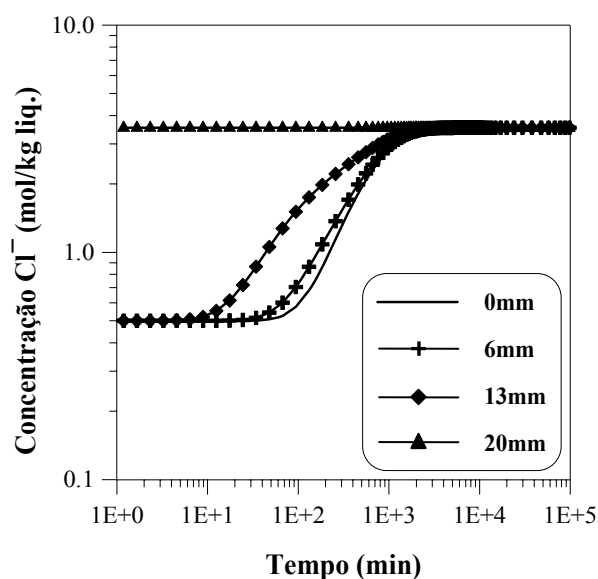
Acoplamento entre os problemas geoquímicos, mecânicos e hidráulicos

Analisando os mecanismos de fluxo e o comportamento mecânico da amostra através das distribuições de suas variáveis hidro-mecânicas e geoquímicas, consegue-se perceber o nível de acoplamento existente entre mudança de porosidade, de concentração de soluto e pressão de poros. Os processos de variações dessas variáveis resultam em alteração no estado de tensão efetiva, geração de fluxo de líquido e deformação vertical da amostra.

Nas Figuras 4.4a e 4.4b se verifica a difusão molecular das espécies de K^+ e de Cl^- , respectivamente. Devido a uma diferença de concentração inicial entre a face superior e o restante da amostra o fenômeno de transporte de massa das espécies é favorecido. No topo da amostra a concentração é maior, pois corresponde ao ponto de inundação por solução de 4.0M de KCl, deste modo, as espécies se difundem ao longo seção transversal da amostra até atingirem sua face inferior.



(a)



(b)

Figura 4.4 – Resultados numéricos do problema geoquímico – ensaio edométrico modificado. (a) difusão da concentração de K^+ . (b) difusão da concentração de Cl^- .

A velocidade com que se processa a difusão molecular do soluto na amostra é maior que a velocidade de dissipação da pressão de poros resultante. Este fenômeno propicia o surgimento de pressão de poros positiva, a qual será dissipada no decorrer do tempo, como ilustra a Figura 4.5a. A variação na pressão de poros acarreta mudança no estado de tensões efetivas da amostra, originando fluxo de líquido no sentido ascendente, ou seja, saindo da amostra por sua face superior Figura 4.5b.

O processo de deformação da amostra de bentonita pode ser compreendido através da análise acoplada da variação da porosidade e/ou índice de vazios com as variáveis geoquímicas e hidráulicas. À medida que as concentrações salinas se difundem e a pressão de poros se dissipa, a porosidade e o índice de vazios da amostra diminuem (Figura 4.6a). Como consequência direta, a amostra se deforma verticalmente, Figura 4.6b, cuja deformação vertical no fim do experimento é de aproximadamente 4mm (em torno de 20% de sua altura).

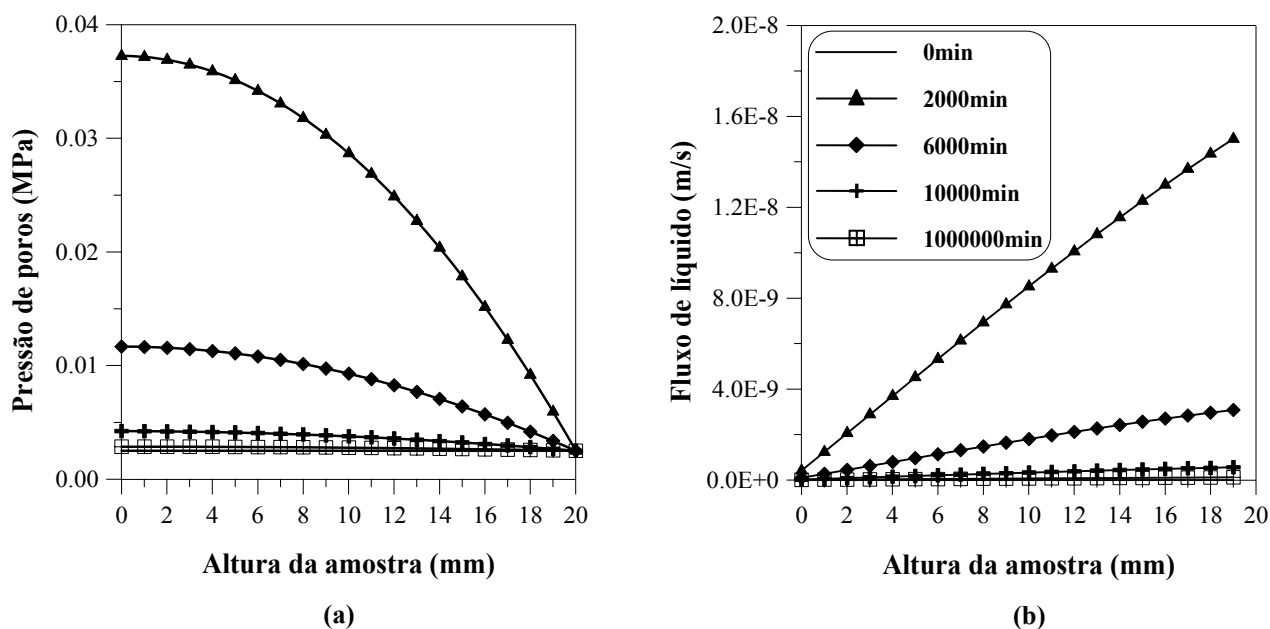


Figura 4.5 – Resultados numéricos do problema hidráulico – ensaio edométrico modificado. (a) evolução da pressão de poros. (b) fluxo de líquido através da amostra.

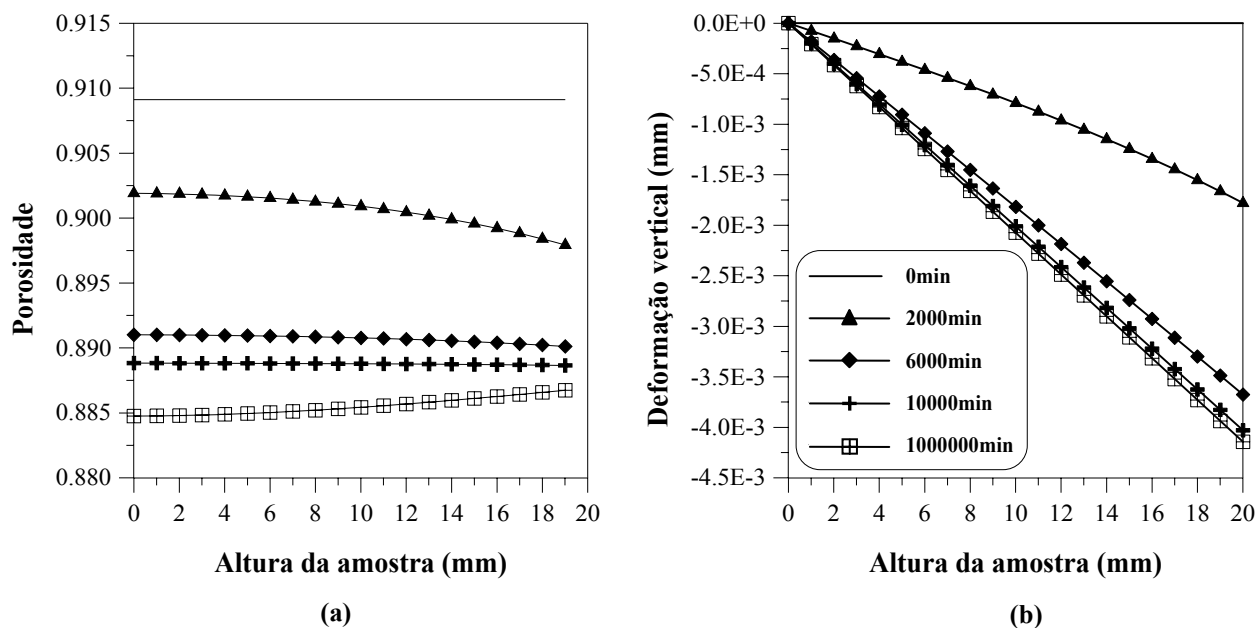


Figura 4.6 – Resultados numéricos do problema mecânico – ensaio edométrico modificado. (a) variação da porosidade. (b) deformação vertical da amostra.

Influência da lei cinética na simulação numérica

Além dos acoplamentos demonstrados anteriormente, as diversas tentativas para reprodução do ensaio mostraram a necessidade de se implementar no modelo numérico uma lei cinética para as variáveis de estado químicas do modelo constitutivo elasto-químico apresentado no Capítulo 3. Observou-se que, sem a consideração dessa lei (equação 3.36), o pulso positivo de pressão de poros estaria ocorrendo antes que o pulso negativo de pressão, cenário contrário à realidade do ensaio de Santamarina. Isto será visto mais adiante neste capítulo (Figura 4.13, β igual a zero, com variação de -100%) quando se fará a análise paramétrica dos parâmetros envolvidos na modelagem.

Essa lei cinética induzirá um retardo nas deformações e geração de poros-pressão positivas causada pela difusão dos solutos na amostra (adensamento osmótico) e sua justificativa física seria o processo químico de transferência de água entre os níveis micro e macroestrutural. Com esta lei consegue-se a antecipação da frente de pressão de poros negativa perante a frente positiva de pressão de poros, situação observada no ensaio.

A Figura 4.7 ilustra o comportamento das curvas de sucção (pressão) osmótica micro e macroestrutural durante o tempo de análise. Percebe-se com bastante clareza o efeito

provocado pela lei cinética para as respostas da microestrutura quanto às ações químicas, cujo comportamento microestrutural se apresenta com um retardamento em relação ao da macroestrutura. Observou-se ainda que quando se submete a amostra a uma solução de 4,0M de KCl, a sucção osmótica, que inicialmente era muito pequena, aumentará em mais de 10 vezes seu valor, chegando a até 23,70MPa.

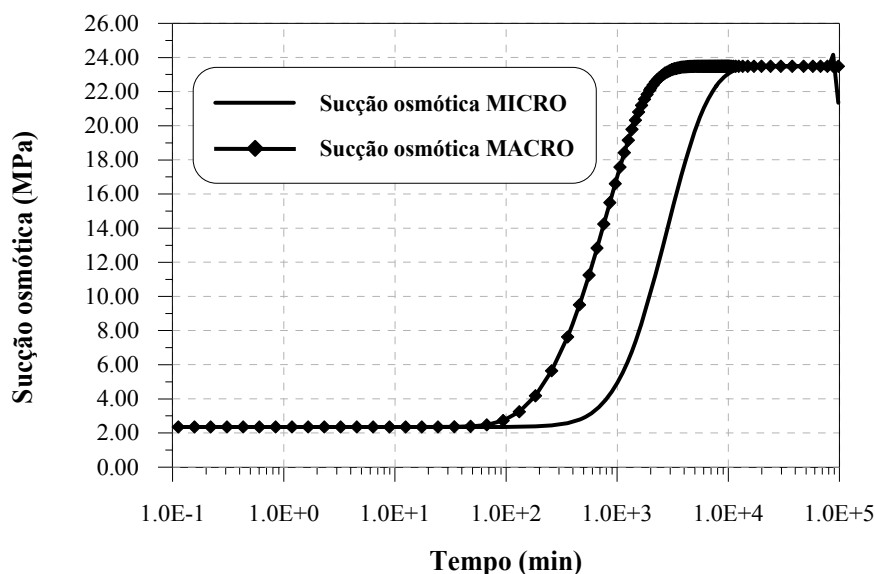


Figura 4.7 – Sucção osmótica microestrutural e macroestrutural calculada numericamente.

A seguir serão apresentados os resultados da simulação numérica onde os efeitos do fluxo osmótico não foram computados na formulação matemática, fato que inviabilizou a reprodução correta do ensaio. Com isso pretende-se mostrar o efeito desses fluxos na modelagem do ensaio, que apesar de serem menores, devem ser considerados na modelagem dos fenômenos que ocorrem na argila quando submetida a ações hidro-mecânicas e geoquímicas.

4.2.5 Simulação Numérica do Ensaio Edométrico Sem a Consideração de Fluxos Osmóticos

Na tentativa de reproduzir os ensaios de Santamarina & Fam (1995) e Santamarina (2006) diversos níveis de acoplamento foram estudados até que se alcançassem os ajustes entre as

curvas teóricas (numéricas) e experimentais. Uma das primeiras tentativas foi modelar o ensaio edométrico de Santamarina & Fam sem considerar os efeitos do adensamento osmoticamente induzido, ou seja, desprezando o termo de fluxo osmótico no fluxo total de líquido (Equação 3.10) e os termos associados à eficiência osmótica (ω) no fluxo total de solutos (Equação 3.21).

Esta análise permitiu constatar a relevância do fluxo osmótico na modelagem do ensaio, já que sem ele o modelo não foi capaz de reproduzir as pressões de poros negativas medidas na face inferior da amostra, conforme mostra a Figura 4.8.

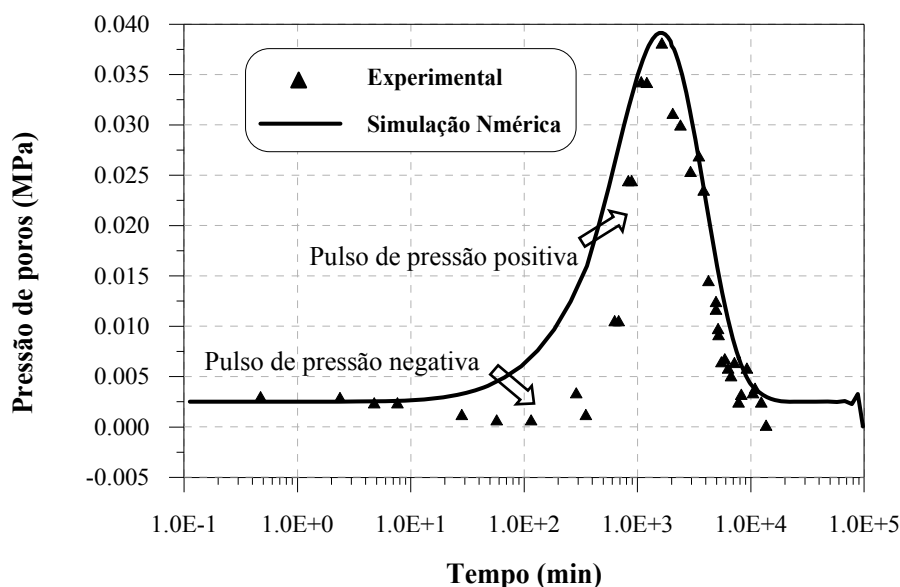


Figura 4.8 – Pressão de poros medida e calculada na face inferior da amostra sem considerar o fluxo osmótico.

Analisando as curvas da Figura 4.8 verifica-se que a simulação numérica reproduziu satisfatoriamente apenas o pulso de pressão de poros positiva observado por Santamarina & Fam, mas não é capaz de reproduzir a frente de pressão de poros negativa. Nesta análise todos os demais parâmetros do solo foram mantidos com relação à análise apresentada anteriormente com a consideração dos fluxos osmóticos.

4.2.6 Simulação Numérica do Ensaio de Compressão Isotrópica

No ensaio de compressão isotrópica de Santamarina & Fam (1995), executado em equipamento triaxial, foi aplicado um estado de tensão isotrópico na amostra, permitindo a drenagem por suas faces superior e inferior (Figura 4.9). Após a etapa de adensamento mecânico sob uma tensão efetiva confinante de 105kPa, a amostra de bentonita foi continuamente exposta a uma solução saturada de KCl, através de sua face inferior, dando início aos mecanismos de adensamentos químicos.

A bentonita utilizada no ensaio de compressão isotrópica é idêntica a do ensaio edométrico, ou seja, suas propriedades geotécnicas são as mesmas descritas anteriormente. Os parâmetros necessários à simulação são os mesmos empregados no ensaio edométrico, incluindo os três parâmetros de acoplamentos (β , ω e ζ). A solução salina de KCl também é a mesma do ensaio edométrico, cuja concentração é igual a 4,0M.

As mesmas seqüências de ações realizadas no experimento quanto a carregamento mecânico e químico foram respeitadas na modelagem numérica. Assim como, se obedeceu na simulação as imposições quanto a condições iniciais e de contorno propostas por Santamarina & Fam (1995).

Nas análises do ensaio de compressão isotrópica se utilizou uma malha de elementos finitos unidimensionais de 30mm (altura da amostra), composta de 31 nós e 30 elementos lineares. As condições de contorno para a fase de exposição à solução salina foram estabelecidas de modo a reproduzir as situações reais do ensaio. Portanto, para o problema mecânico, se aplicou uma carga constante isotrópica de 105kPa em toda a amostra e se restringiu o deslocamento vertical da face inferior (base). Para os problemas hidráulicos e de transporte de soluto, na face inferior da amostra, se fixou a pressão de poros igual a zero e se impôs as concentrações da solução de KCl igual a 4.0M. Para a face superior (topo) se considerou drenagem livre, ou seja, se impôs pressão de poros igual a zero e os fluxos de solutos que saem da amostra são dados em função do fluxo de líquido expelido nessa face.

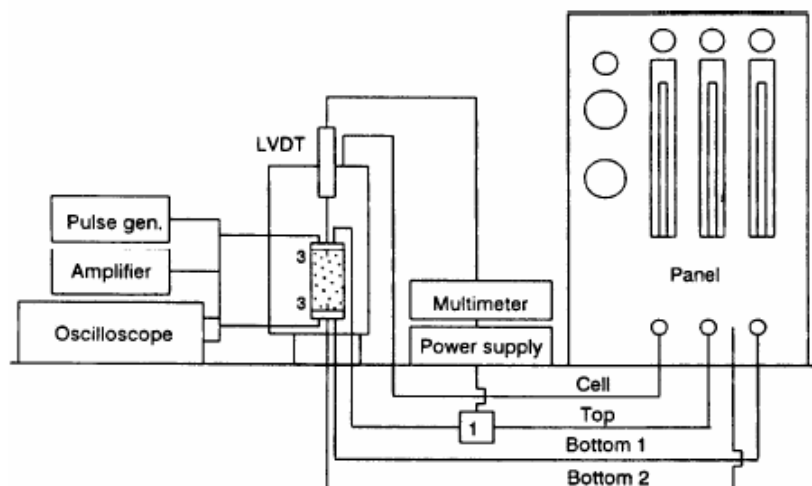


Figura 4.9 – Esquema da célula isotrópica (Santamarina & Fam, 1995).

Observando os resultados experimentais de Santamarina & Fam (1995) para a etapa dos mecanismos de adensamentos químicos, Figura 4.10, se pode constatar que o volume expelido pela face inferior da amostra inicialmente é maior que o volume expelido pela face superior. Tal comportamento já era esperado, pois como se sabe, o processo de difusão ocorre da região de concentração mais elevada para a zona de baixa concentração. Assim sendo, nesse ensaio, o processo de difusão molecular se inicia na face inferior da amostra, onde se introduz a solução salina. Ainda segundo Santamarina & Fam (1995), depois de aproximadamente 2000 minutos, os fluxos de líquidos são praticamente iguais em ambas as faces da amostra.

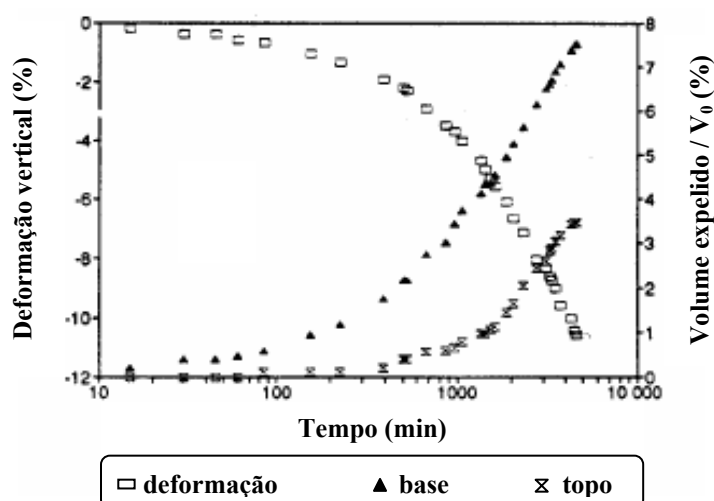


Figura 4.10 – Resultados experimentais: deformação vertical e volume expelido para a amostra de bentonita (Santamarina & Fam, 1995).

Os resultados alcançados com a simulação numérica do modelo hidro-mecânico e geoquímico reproduziu satisfatoriamente o comportamento qualitativo do ensaio (Figura 4.11), descrito anteriormente.

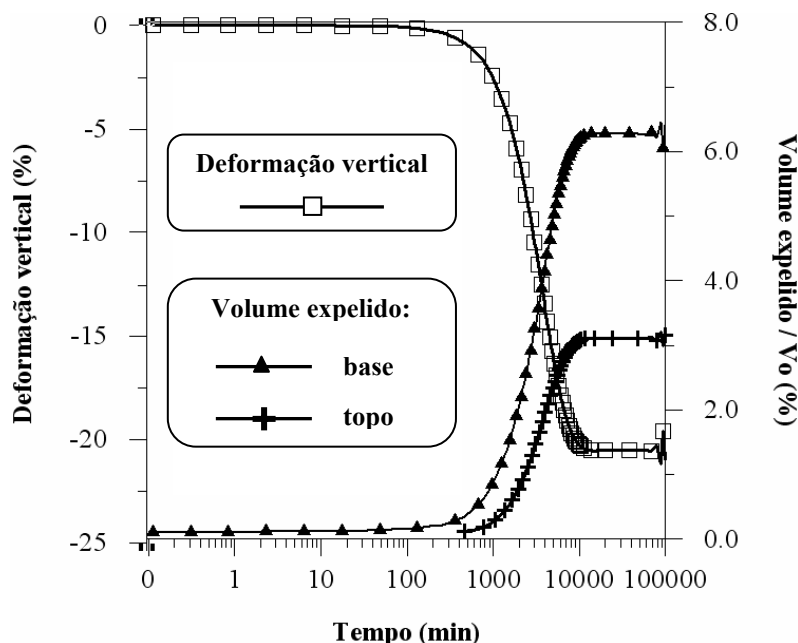


Figura 4.11 – Resultados numéricos: deformação vertical e volume expelido para a amostra de bentonita.

Analogamente aos estudos do ensaio edométrico será realizada uma análise das variáveis geoquímicas, mecânicas e hidráulicas ao longo da amostra. Tal análise visa uma compreensão mais aprofundada do comportamento geotécnico da bentonita para a situação do ensaio de compressão isotrópica.

A difusão molecular das espécies de K^+ e Cl^- pode ser observada nas Figuras 4.12a e 4.12b, respectivamente. A diferença de concentração inicial entre a face inferior, ponto de inundação da amostra pela solução de KCl à 4.0M, e seu restante, favorece a migração das espécies químicas. Deste modo, as concentrações de K^+ e Cl^- se difundem através da amostra até alcançarem sua face superior.

O processo de difusão molecular e os efeitos osmóticos na amostra propiciam o predomínio de pressão de poros positivas, entretanto para o tempo de 100000 minutos se verifica a ocorrência de pressão de poros negativa (Figura 4.13a). A alteração no estado de tensões

efetivas decorrentes da dissipação da pressão de poros acarreta geração de fluxo de líquido saindo da amostra pelas faces superior e inferior (Figura 4.13b).

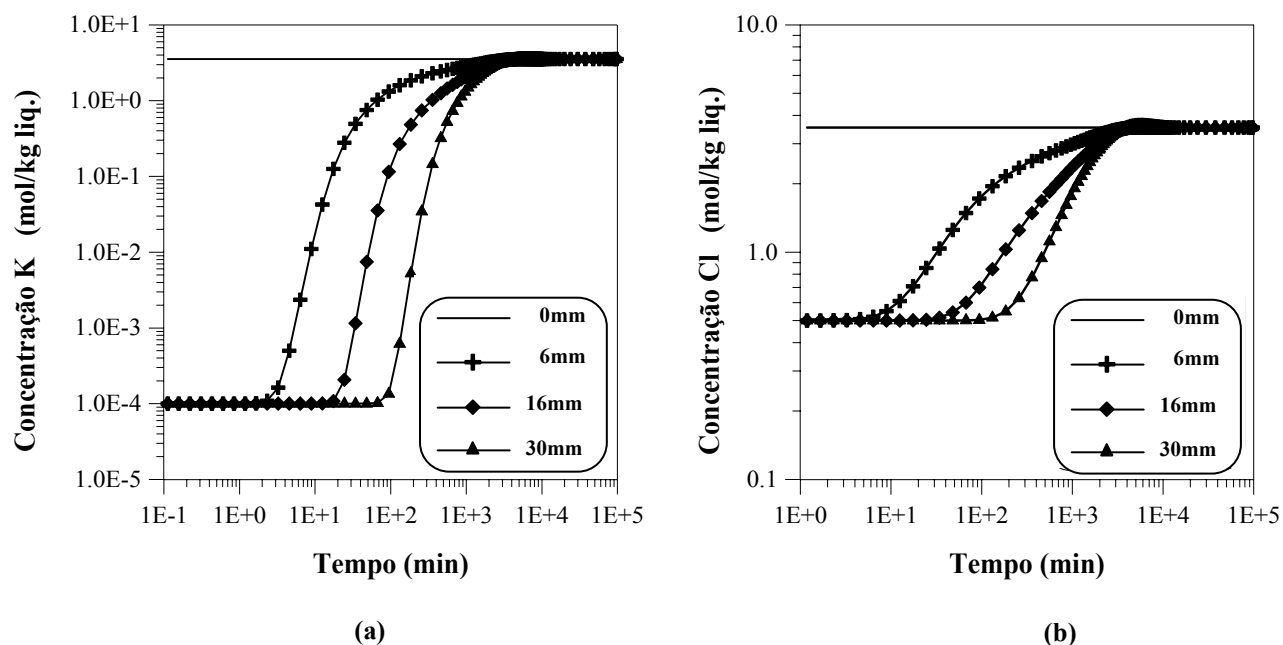


Figura 4.12 – Resultados numéricos do problema geoquímico – ensaio de compressão isotrópica. (a) difusão da concentração de K^+ . (b) difusão da concentração de Cl^- .

Assim como no ensaio de Santamarina & Fam (1995), através da Figura 4.13b também se pode constatar que com a simulação numérica inicialmente se expelle mais água pela face inferior da amostra (ver tempo de 558 minutos). Ainda segundo Santamarina & Fam (1995), depois de aproximadamente 2000 minutos os fluxos de líquidos expelidos são praticamente iguais para ambas as faces da amostra, tal comportamento foi reproduzido também com a simulação numérica (ver Figura 4.13b).

Com o avanço da difusão molecular das concentrações salinas ao longo da amostra e da dissipação da pressão de poros ao longo do tempo, se constata que os índices físicos de porosidade e de índice de vazios da amostra diminuem (Figura 4.14a). Variações desses índices induzem deformações nos materiais. Neste caso, a amostra se deforma verticalmente, como visto na Figura 4.14b, ao passo que no final do experimento a deformação vertical total é de aproximadamente 6mm.

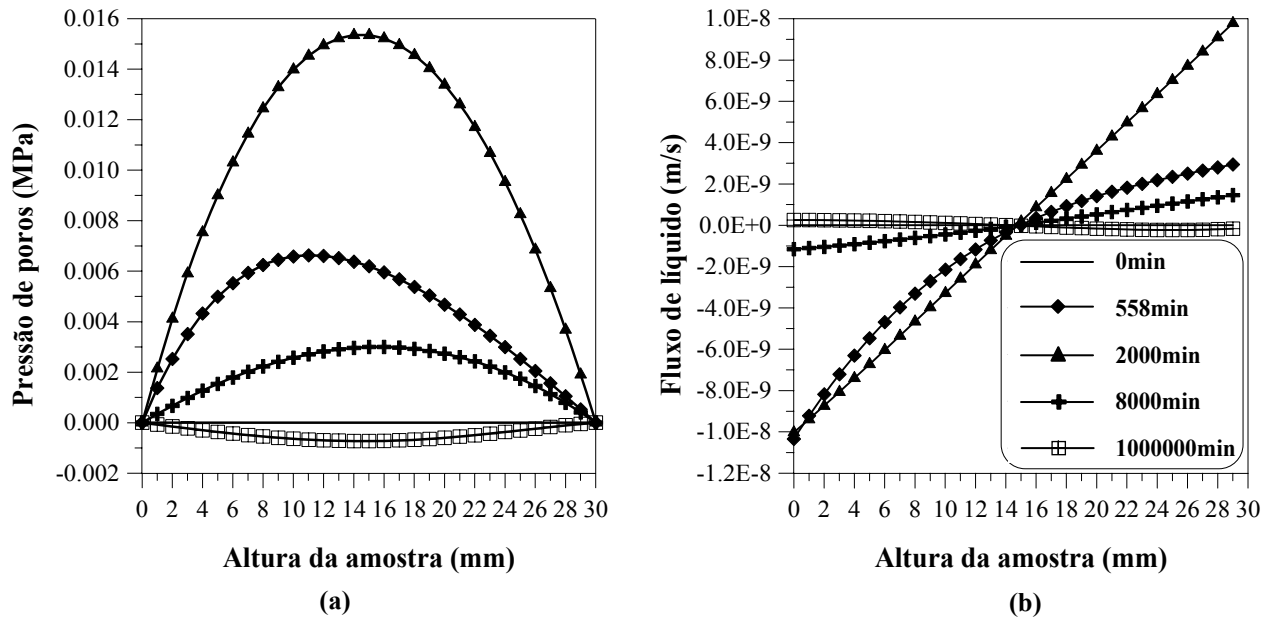


Figura 4.13 – Resultados numéricos do problema hidráulico – ensaio de compressão isotrópica. (a) evolução da pressão de poros. (b) fluxo de líquido através da amostra.

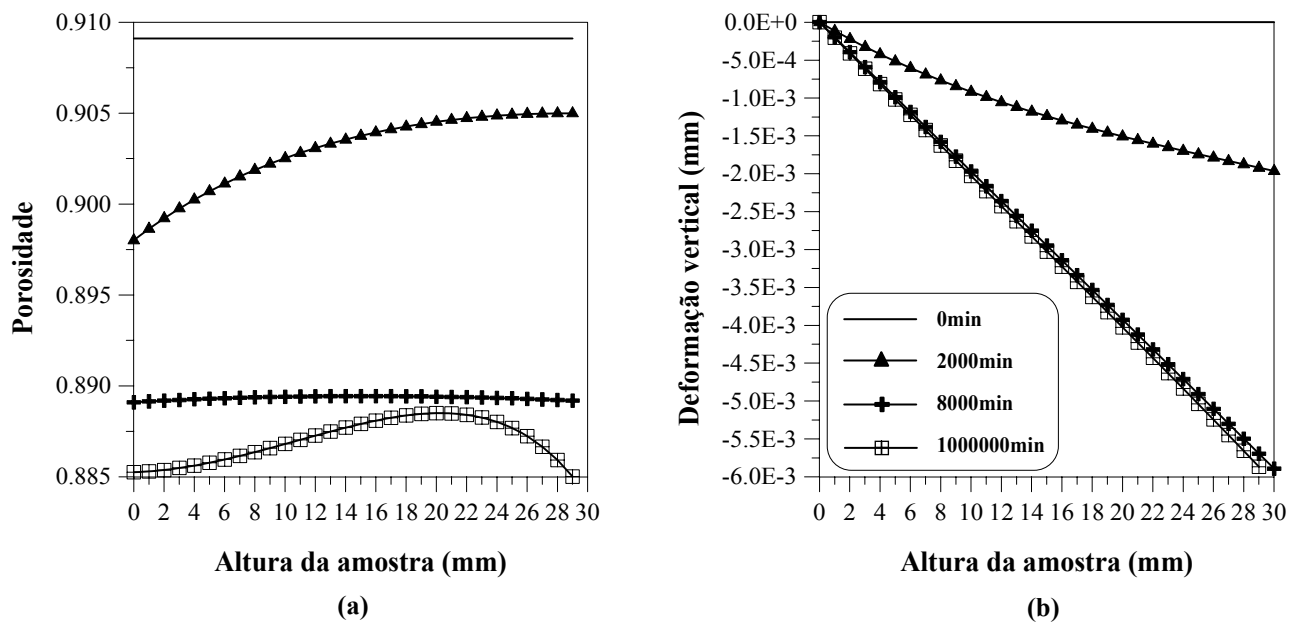


Figura 4.14 – Resultados numéricos do problema mecânico – ensaio de compressão isotrópica. (a) variação da porosidade. (b) deformação vertical da amostra.

4.3 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS PARÂMETROS DO MODELO

A análise de sensibilidade é uma técnica matemática empregada para computar os gradientes das respostas do problema, também conhecidos como sensibilidades, quando critérios ou parâmetros são alterados. A análise de sensibilidade permite avaliar a influência dos parâmetros nas variáveis de projeto, possibilitando uma melhor visualização e maior entendimento do problema, sobretudo quando se trata de acoplamentos complexos, onde diversos parâmetros de natureza diferentes estão envolvidos.

Durante a modelagem do ensaio edométrico de Santamariana e Fam observou-se que os novos parâmetros de acoplamento introduzidos na formulação (ζ , razão entre os coeficientes de variação volumétrica geoquímico e mecânico; ω , eficiência osmótica e β , constante cinética) influenciavam fortemente as variáveis de projeto. Tal fato foi verificado no ajuste das curvas das variáveis de projeto ao longo do tempo, as quais assumiam inúmeros e distintos formatos a medida que esses parâmetros eram modificados.

A etapa de ajuste entre curvas teóricas e experimentais se mostrou bastante difícil e dispendiosa, entretanto permitiu constatar que tais parâmetros além de traduzir o sentido físico do problema também se apresentavam como ótimos calibradores do modelo. Para se alcançar o ajuste entre as curvas foram simuladas diversos cenários com distintos valores para os três parâmetros citados. O ajuste fino das curvas de deformação vertical (Figura 4.2) e pressão de líquido (Figura 4.3) foi atingido ainda com alterações na permeabilidade intrínseca (k) do solo.

Nesse sentido, a análise de sensibilidade se apresentou como a ferramenta adequada para indicar como se deve alterar cada parâmetro na busca do melhor ajuste para as curvas. A influência de cada parâmetro foi avaliada isoladamente, ou seja, se mantém inalterados os demais parâmetros e se aplica variações apenas naquele que se pretende analisar de momento. As variáveis de projeto empregadas para aferir a influência dos parâmetros no problema foram a deformação vertical da amostra e a pressão de poros máxima (pulso positivo) e mínima (pulso negativo) desenvolvida durante o ensaio na face inferior da amostra.

Os valores dos parâmetros empregados para alcançar os ajustes das curvas das variáveis de projeto (Figura 4.2 e 4.3) foram designados como valores de referência (Tabela 4.3) para a

análise de sensibilidade. Impõe-se uma variação percentual de +100% a -100%, com incremento de 10%, para os parâmetros (ζ , ω , β , k) cuja influência está sendo avaliada. Para o valor de -100%, o parâmetro tem seu efeito anulado; 0% corresponde ao valor de referência do parâmetro (ou seja, não há incremento) e +100% representa o dobro do valor de referência.

Tabela 4.3 – Valores de referência dos parâmetros adotados para análise de sensibilidade.

DESCRIÇÃO DOS PARÂMETROS	SÍMBOLO	VALOR DE REFERÊNCIA	UNIDADE
Permeabilidade intrínseca	k	9,70E-19	m ²
Eficiência osmótica	ω	0,00045	Ad.
Razão entre os coef. volumétricos geoquímico e mecânico	ζ	0,00972	Ad.
Constante cinética	β	7,00E-06	Ad.

O grau de sensibilidade das variáveis de projeto a cada parâmetro é avaliado a partir da inclinação das retas obtidas no gráfico: incremento da variável versus incremento do parâmetro. Quanto maior a inclinação das retas, maior será a influência do parâmetro sobre a variável de projeto analisada, curvas que tendem a horizontalidade expressam baixíssima ou nenhuma relevância do parâmetro sobre a variável.

O comportamento da deformação vertical da amostra apresentou forte influência do parâmetro ζ , cuja inclinação de sua curva é de aproximadamente 45°, Figura 4.15, sendo praticamente invariável para alteração dos parâmetros k , β e ω . Tal fato é explicado pela formulação do índice de vazios e tensão efetiva proposta, uma vez que, variações dessas variáveis são frutos de alterações na tensão efetiva total, pressão de poros e concentração salina na amostra. A eficiência osmótica (ω) está associada aos efeitos do fluxo osmótico e, portanto contribui de maneira indireta na mudança de volume da amostra apresentando pouca influência no seu comportamento mecânico.

O parâmetro ζ ativa a contribuição da variação da concentração salina no cálculo da tensão efetiva. Do mesmo modo, tal parâmetro rege o mecanismo de mudança de volume do acoplamento químico-mecânico, o adensamento osmótico, o qual age diretamente no comportamento mecânico do solo argiloso. Interações físico-químicas no nível microestrutural acarretam redução da espessura da camada dupla difusa e conseqüentemente

deformações plásticas na macroestrutura. Isto explica a forte influência desse parâmetro na variação volumétrica da amostra.

A pressão de poros máxima, que representa o valor máximo do pulso positivo de pressão, Figura 4.3, apresentou dependência considerável do parâmetro ζ e da constante cinética (β), sendo praticamente indiferente variação da eficiência osmótica. Observando a Figura 4.16 pode-se constatar que a inclinação da reta de variação do parâmetro ζ é mais acentuada, o que expressa sua maior influência sobre a pressão de poros positiva. Tanto o parâmetro ζ como a constante cinética influencia diretamente proporcional no comportamento da pressão de poros positiva, ou seja, aumentos nesses parâmetros acarretam aumentos nesta variável de projeto.

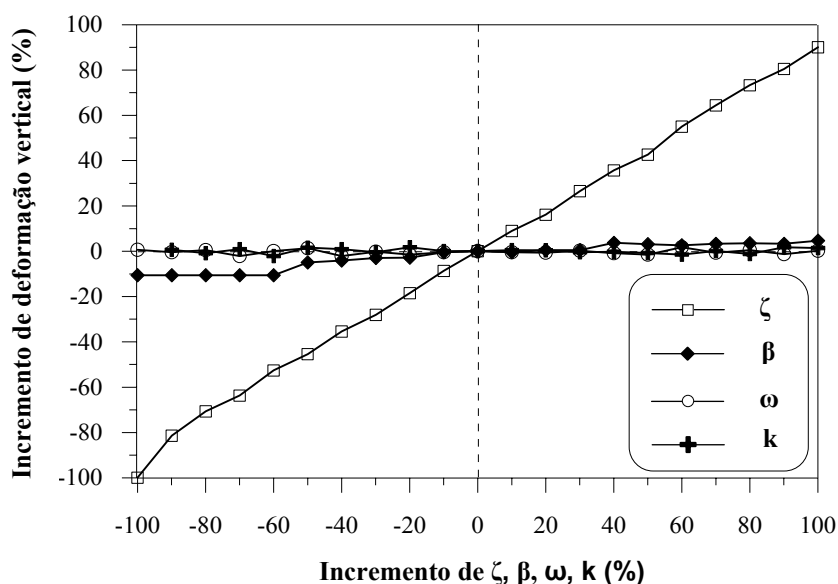


Figura 4.15 – Análise de sensibilidade da deformação vertical da amostra aos parâmetros ζ , β , ω e k .

Entretanto, a dependência da pressão de poros positiva com a permeabilidade intrínseca (k) se estabelece de forma contrária, incrementos na permeabilidade trás decréscimos na pressão de poros. A compreensão de tal efeito deve-se ao fato de que valores elevados de permeabilidade intrínseca viabilizam a ocorrência do transporte de fluido no meio, possibilitando a dissipação da pressão de poros mais rapidamente. A análise reversa também é verdadeira, ou seja, baixas permeabilidades dificultam o fluxo de fluido e aumentos consideráveis da pressão de poros são verificados. A figura 4.16 traduz com bastante clareza esse comportamento.

Mais uma vez, a explicação para a forte sensibilidade da pressão de poros positiva ao parâmetro ζ está no entendimento do mecanismo de mudança de volume preponderante. O pulso positivo de pressão de líquido está associado ao adensamento osmótico, fruto da

alteração do princípio das tensões efetivas, cujo parâmetro ativador do problema é o ζ . A constante cinética que foi introduzida no comportamento mecânico quando se redefiniu as tensões efetivas, expressando um retardamento na pressão osmótica, e, portanto atuando na pressão de poros de forma indireta.

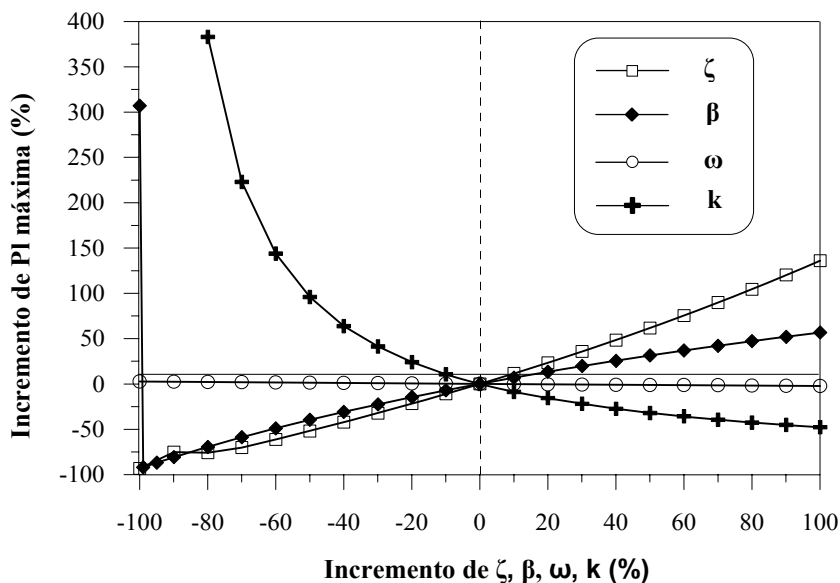


Figura 4.16 – Análise de sensibilidade da pressão de poros máxima da amostra aos parâmetros ζ , β , ω e k .

À medida que o valor do parâmetro ζ diminui o pulso de pressão de poros positivas se reduz. (Figura 4.17). Quando o efeito do adensamento osmótico é anulado, ou seja, ζ é zero, a frente de pressões de poros positivas passa a não existir. Desta maneira, a introdução do conceito de acoplamento químico-mecânico (mecanismo de adensamento osmótico) é fundamental para a modelagem adequada do ensaio de Santamarina e dos fenômenos que o envolve.

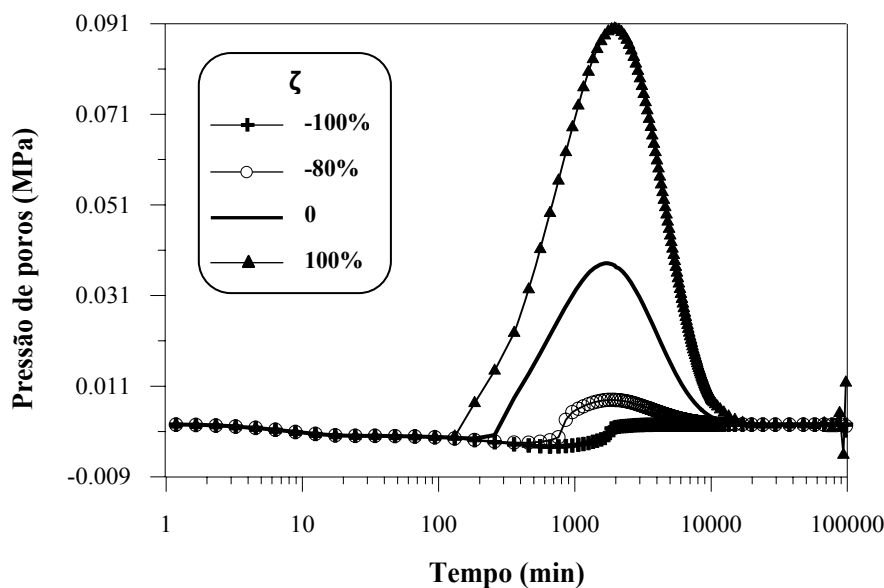


Figura 4.17 – Sensibilidade da pressão de poros a variações no parâmetro ζ .

A análise de sensibilidade da pressão de poros mínima (frente de pressão negativa) estabelece que a eficiência osmótica (ω) e a permeabilidade intrínseca (k) influenciam diretamente a variável de projeto em questão, enquanto que as variações de parâmetros ζ e β são inversamente proporcionais às variações da pressão de poros mínima (Figura 4.18). Tendo em vista que, ζ e β impulsionam diretamente ganhos significativos na pressão de poros como discutidos anteriormente.

A eficiência osmótica está associada às alterações do fluxo de Darcy através da introdução do termo de fluxo osmótico de líquido, mecanismo de adensamento osmoticamente induzido. Devido ao gradiente osmótico a água sairá da amostra ocasionando geração de pressão de poros negativa, aumentando a tensão efetiva e conseqüentemente possibilitando a retração do solo. Deste modo, alterações na eficiência osmótica comprometem unicamente alterações na tensão efetiva, não afetando diretamente o comportamento mecânico dos solos argilosos. Por conta disto, a eficiência osmótica influencia fortemente o pulso de pressões negativas e pouco interfere no pulso de pressões positivas e no comportamento mecânico da amostra.

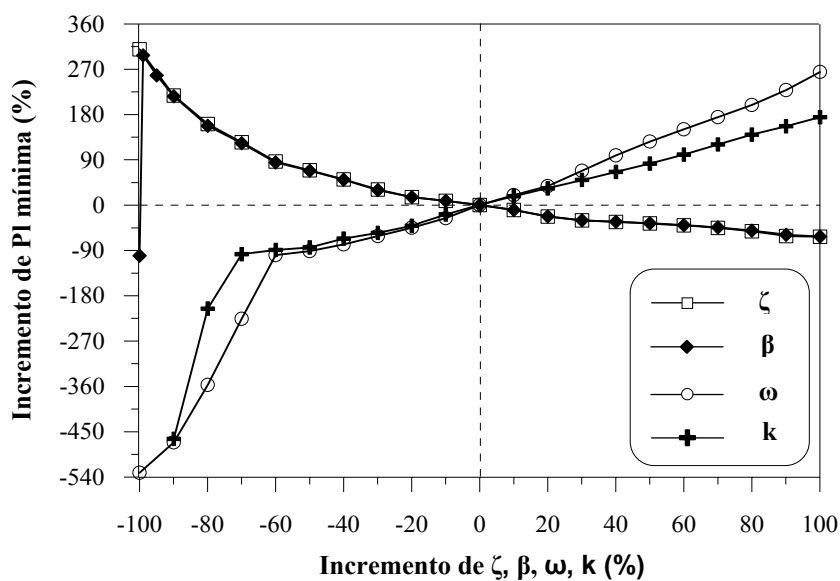


Figura 4.18 – Análise de sensibilidade da pressão de poros mínima da amostra aos parâmetros ζ , β , ω e k .

Analisando as Figuras 4.16 e 4.18, constata-se que quando a constante cinética (β) assume o valor de -100%, ou seja, β igual à zero, a curva foge de sua tendência natural. Ao se anular a constante cinética o código interpreta que nenhuma lei cinética está sendo usada e ativa a hipótese de equilíbrio local para a variável de estado química. Não considerar a lei cinética

anula o efeito de retardo na pressão osmótica, como resposta, o pulso de pressão de poros positiva chega antes do pulso negativa (Figura 4.19), configuração contrária ao ensaio de Santamarina.

A sensibilidade da frente de pressão de poros negativa à eficiência osmótica pode ser observada na Figura 4.20. À medida que a eficiência osmótica diminui a pressão de poros tende a se elevar, reduzindo, portanto o pulso de pressão negativa existente antes do pico de pressão de poros positiva. A nulidade da eficiência osmótica representa a não consideração do termo de fluxo osmótico na equação de fluxo global de líquido. Este fato tem como consequência direta a não geração de pressão de poros negativa.

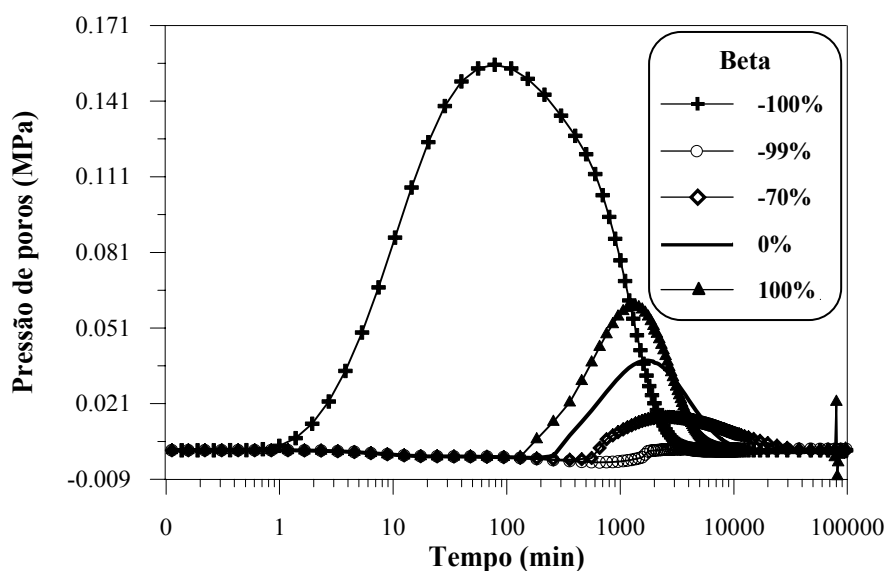


Figura 4.19 – Sensibilidade da pressão de poros a variações no parâmetro da constante cinética (β).

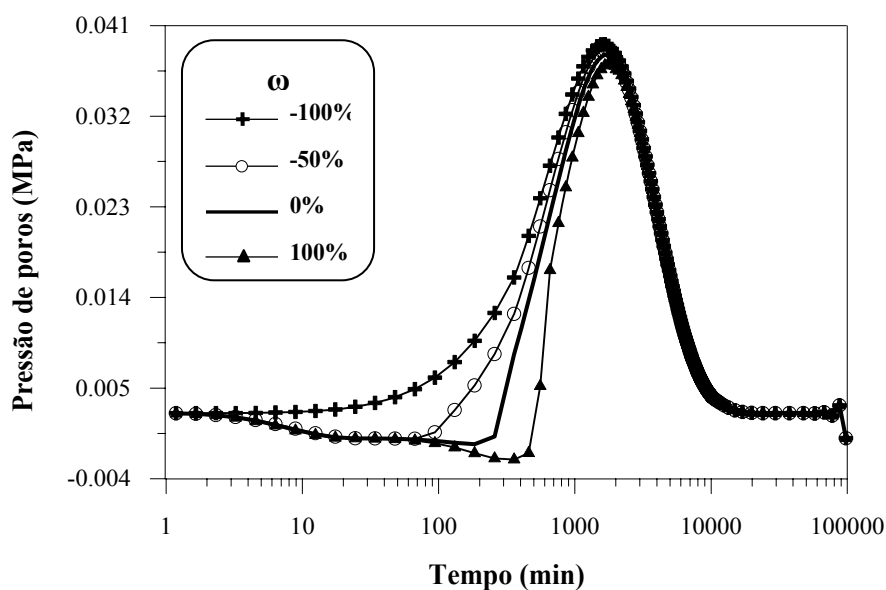


Figura 4.20 – Sensibilidade da pressão de poros a variações no parâmetro de eficiência osmótica (ω).

Diante dos resultados encontrados como a modelagem numérica pode-se considerar que o código proposto para o estudo dos efeitos osmóticos em solos argilosos se mostrou bastante satisfatório. Ao analisar-se as curvas de ajustes da deformação vertical e pressão de poros desenvolvidas na amostra, Figuras 4.2 e 4.3, respectivamente, percebe-se uma adequação entre as curvas teóricas e experimentais bastante razoável e aceitável.

A análise de sensibilidade das variáveis de projeto (deformação e pressão de poros) aos parâmetros de acoplamento ζ , β e ω demonstrou a importância em se introduzir esses parâmetros na formulação matemática. Observando as curvas de sensibilidades (Figuras 4.17, 4.19 e 4.20) pode-se constatar que a nulidade desses parâmetros traduz desvios significativos no comportamento encontrado no ensaio, dificultando ou impossibilitando o ajuste entre as curvas. Assim sendo, tais parâmetros, ou melhor, os conceitos físicos e fenômenos que os envolvem, são fundamentais para se reproduzir o ensaio de Santamarina & Fam.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS

5.1 CONCLUSÕES

A revisão desenvolvida neste trabalho sobre os fenômenos osmóticos em argilas saturadas visa compreender os efeitos físico-químicos inerentes a solos de granulometria fina. Em particular, entender o comportamento geoquímico e mecânico dos solos argilosos quimicamente ativos quando expostos a soluções salinas. O desafio era obter um modelo numérico, baseado no método dos elementos finitos, capaz de simular satisfatoriamente o acoplamento entre deformações, fluxos de líquidos e de solutos. Como referência para validação do modelo se utilizou os ensaios realizados por Santamarina & Fam (1995) e Fam & Santamarina (1996). A seguir serão destacadas as principais conclusões obtidas nesta pesquisa:

- A consideração do ponto de vista qualitativo da teoria da dupla camada difusa se mostrou fundamental para entender os mecanismos de fluxos acoplados e de adensamentos químicos em argilas quimicamente ativas expostas a solução salina.
- A introdução do conceito de material de dupla estrutura, ou seja, a distinção entre os níveis micro e macroestrutural dos minerais argílicos, deu subsídios teóricos para se propor uma lei cinética no modelo constitutivo químico-mecânico. Apesar de sua simplicidade, essa lei foi essencial para a reprodução dos ensaios de Santamarina & Fam, melhorando substancialmente os resultados.

- A implementação da referida lei cinética para as variáveis de estado químicas propiciou um retardamento entre as respostas do problema mecânico. Tal fato viabiliza a antecipação da frente de pressão de poros negativa perante a frente positiva de pressão de poros, situação diagnosticada no ensaio e não atingida numericamente sem a consideração da constante cinética (β).
- A não consideração dos efeitos do adensamento osmoticamente induzido, ou seja, desprezar os termos da eficiência osmótica (ω) nas equações de fluxo de líquido e transporte de soluto, tem como consequência a não geração do pulso negativo de pressão de poros (ver Figura 4.8). Isto evidencia a necessidade de implementação desses mecanismos.
- Os efeitos de um acoplamento químico-mecânico foram expressos através da alteração do princípio das tensões efetivas. O modelo numérico empregou o conceito da tensão efetiva quimicamente modificada, cujas variações na tensão efetiva são induzidas por variação da tensão total, pressão de líquido e pressão osmótica. Isto tornou possível a modelagem do pulso positivo de pressão de poros do ensaio.
- O simulador CODE_BRIGTH e as novas implementações mostraram-se capazes de descrever com satisfação os ensaios realizados por Santamarina & Fam. Validando qualitativa e quantitativamente o modelo proposto neste trabalho.
- No que se refere à deformação vertical desenvolvida pela amostra de bentonita no ensaio edométrico modificado, o código foi capaz de reproduzir de maneira bastante fiel o resultado experimental (ver Figura 4.2). A deformação da amostra ficou em torno de 20% de sua altura concordando com o valor encontrado experimentalmente.
- O mecanismo de mudança de volume preponderante é o adensamento osmótico, com a geração de um forte pulso de pressão de poros positiva, cuja causa está associada à resposta não drenada do solo à tendência de retração química.
- A geração de pressão de poros positiva maior que a negativa ocorre porque os sais se difundem na amostra mais rapidamente que as pressões de poros se dissipam. O transporte de sais dissolvidos na amostra, cujo parâmetro dominante é o coeficiente

de difusão molecular, prepondera sobre o fluxo de líquido. O transporte de líquido é responsável pela dissipação da pressão de poros, tendo como parâmetro fundamental a permeabilidade, que para os solos argilosos é muito baixa.

- Os resultados alcançados com a simulação numérica do modelo hidro-mecânico e geoquímico reproduziu satisfatoriamente o comportamento qualitativo do ensaio de compressão isotrópica de Santamarina & Fam (1995). Pode ser constatado que o volume expelido pela face inferior da amostra inicialmente é maior que o volume expelido pela face superior (Figura 4.11). Tal comportamento já era esperado, pois como se sabe, o processo de difusão ocorre da região de concentração mais elevada (ponto de inundação da amostra pela solução salina) para a zona de baixa concentração.
- A etapa de ajuste entre curvas teóricas e experimentais se mostrou bastante difícil e trabalhosa, entretanto permitiu constatar que os parâmetros de acoplamento ζ , β e ω além de traduzir o sentido físico do problema também se apresentavam como ótimos calibradores do modelo. Tal fato foi verificado no ajuste das curvas das variáveis de projeto ao longo do tempo, as quais assumiam inúmeros e distintos formatos à medida que esses parâmetros eram modificados.
- O problema também apresentou forte influência da permeabilidade intrínseca do material, portanto um bom ajuste desse parâmetro se mostrou importante para se alcançar a concordância entre as curvas.
- A análise de sensibilidade se apresentou como a ferramenta adequada para indicar como se deve alterar cada um desses parâmetros na busca do melhor ajuste para as curvas.
- Observando as curvas de sensibilidades (Figuras 4.17, 4.19 e 4.20) pode-se constatar que a nulidade desses parâmetros traduz desvios significativos, dificultando ou impossibilitando o ajuste das curvas. Tais parâmetros, ou melhor, os conceitos físicos e fenômenos que os envolvem, são fundamentais para se reproduzir o ensaio de Santamarina & Fam.

- Diante dos resultados encontrados como a modelagem numérica pode-se considerar que o código e o modelo conceitual proposto para o estudo dos efeitos osmóticos em solos argilosos se mostraram bastante satisfatório, apresentando uma concordância bastante razoável e aceitável entre as curvas teóricas e experimentais.

5.2 SUGESTÕES PARA FUTURAS PESQUISAS

- Ampliar o modelo conceitual proposto e aplicar a solos não saturados.
- Implementar os efeitos da temperatura no modelo conceitual, possibilitando resolver os problemas de acoplamentos THMC (termo-hidráulico-mecânico e químico).
- Desenvolver teoricamente o modelo para meios de dupla estrutura, estabelecendo as equações e variáveis para o fluxo e transporte de solutos para ambos os níveis estruturais (macro e microestruturais).
- Empregar o modelo para simular problemas práticos de engenharia de petróleo, como a instabilidade dos poços durante a fase de perfuração em materiais quimicamente ativos (folhelho).
- Aplicar o simulador a problemas de geotecnia ambiental relacionado com armazenamento de materiais contaminantes isolados com barreiras de argila. Exemplos: os armazenamentos de resíduos radioativos e aterros sanitários.

CAPÍTULO 6

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

- ALONSO, E. E. (1998) – *Modelling expansive soil behaviour*. Second International Conference on Unsaturated Soils. Beijing, China, Vol.1, 37-70.
- BARBOUR, S. L. & FREDLUND, D. G. (1989) – *Mechanisms of osmotic flow and volume change in clay soils*. Canadian Geotechnical Journal 26, 551-562.
- BOLT, G. H. (1956) – *Physico-chemical analysis of the compressibility of pure-clays*. *Géotechnique*, Vol. 6, 86-93.
- BRESLER, E. (1973) – *Anion exclusion and coupling effects in nonsteady transport through unsaturated soils: theory*. Soil Science Society of America Journal 37, 663-669.
- CHENG, H. & YEH, G. (1998) – *Development and demonstrative application of a 3-D numerical model of subsurface flow, heat transfer, and reactive chemical transport: 3DHYDROGEOCHEM*. Journal of Contaminant Hydrology, Vol. 34, 47-83.
- DANA, J. D. (1984) – *Manual de mineralogia*. Livros Técnicos e Científicos. Rio de Janeiro.
- DI MAIO, C. (1996) – *Exposure of bentonite to salt solution: osmotic and mechanical effects*. *Géotechnique* 46 (4), 695-707.

- DÍAZ, A. M. F. (2004) – *Caracterización y modelización del agua intersticial de materiales arcillosos: estudio de la bentonita de Cortijo de Archidona*, Tesis Doctoral, Universidad Autonoma de Madrid, Madrid, 505.
- FAM, M. & SANTAMARINA, J.C. (1996). *Coupled diffusion-fabric-flow phenomena: an effective stress analysis*. *Canadian Geotechnical Journal*, 33, 515-522.
- FREDLUND, D. G. & RAHARDJO, H. (1993) – *Soil mechanics for unsaturated soils*. John Wiley & Sons, New York, 517.
- FRYDMAN, M. D. A. & FONTOURA, S. A. B. (2001) – *Modeling aspects of wellbore stability in shales*. Buenos Aires, Argentina.
- GARCÍA, O. C. C. (2003) – *Avaliação da influência da interação rocha-fluido na estabilidade de poços*. Dissertação de Mestrado, Pontificia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 132.
- GENS, A. & ALONSO, E. E. (1992) – *A framework for the behaviour of unsaturated expansive calys*. *Canadian Geotechnical Journal*, 29, 1013-1032.
- GUIMARAES, L. J. N. (2002) – *Análisis multi-componente no isoterma em medio poroso deformable no saturado*, Tesis Doctoral, Universitat Politècnica Catalunya, Barcelona, 195.
- GREENBERG, J., MITCHELL, J. K. & WITHERSPOON, P. (1973) – *Coupled salt and water flows in a groundwater basin*. *Journal of Geophysical Reserves* 78, 6341-6353.
- JUCÁ, J. F. T. (1990) – *Comportamiento de los Suelos Parcialmente Saturados Bajo Succión Controlada*. Tesis Doctoral, E. T. S. Caminos, Canales y Puertos, Universidad Politécnica de Madrid. 342.
- KACZMAREK, M. (2001) – *Chemically induced deformation of a porous layer coupled with advective-dispersive transport. Analytical solutions*. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 25, 757-770.

- KACZMAREK, M. & HUECKEL, T. (1998) – *Chemo-mechanical consolidation of clays: analytical solutions for a linearized one-dimensional problem*. *Transport in Porous Media* 32, 49-74.
- KEMPER, W. D. & ROLLINS, J. B. (1966) – *Osmotic efficiency coefficients across compacted clays*. *Soil Science Society of America Proceedings* 30, 529-534.
- LAMBE, T. W. & WHITMAN, R. V. (1969) – *Soil Mechanics*. John Wiley, New York.
- MITCHELL, J. K. (1976) – *Fundamentals of soil behavior*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 422.
- MITCHELL, J. K. (1991) – *Conduction phenomena: from theory to geotechnical practice*. *Géotechnique* 41, 299-340.
- MITCHELL, J. K. (1993) – *Fundamentals of soil behavior*. John Wiley & Sons, Inc., New York, 437.
- OLIVELLA, S., GENS, A., CARRERA, J. & ALONSO, E. E. (1995) – *Numerical formulation for a simulator (CODE_BRIGBT) for the coupled analysis of saline media*. *Engineering Computations*, V. 7, 87-112.
- OLSEN, H.W. (1972) – *Liquid movement through kaolinite under hydraulic, electric, and osmotic gradients*. *American Association of Petroleum Geologists Bulletin* 56 (10), 2022–2028.
- ONSAGER, L., (1931a) – *Reciprocal relations in irreversible processes*. I. *Physical Review* 37, 405-426.
- ONSAGER, L. (1931B) – *Reciprocal relations in irreversible processes*. ii. *Physical Review* 38, 2265-2279.

- PETERS, G. P. & SMITH, D. W. (2004) – *The influence of transport on coupled chemical and mechanical consolidation of clays*. *Mechanics of Materials*, V. 36, 467-486.
- SANTAMARINA, J. C. (2006) – *Comunicação pessoal*.
- SANTAMARINA, J. C. & FAM, M. (1995) – *Changes in dielectric permittivity and shear wave velocity during concentration diffusion*. *Canadian Geotechnical Journal* 32, 647-659.
- SÁNCHEZ, M., GENS, A., GUIMARÃES, L. N. & OLIVELLA, S. (2005) – *A double structure generalized plasticity model for expansive materials*. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* 29, 751-787.
- SÁNCHEZ, M., GENS, A., GUIMARÃES, L. N. & OLIVELLA, S. (2006) - *A constitutive model for compacted expansive clay*. Technical University of Catalunya, Barcelona, Spain.
- SANTOS, H. & PEREZ, R (2001). *What have we been doing wrong in wellbore stability?* SPE Latin American and Caribbean Petroleum Engineering Conference. Buenos Aires, Argentina. SPE 69493.
- SOCIEDADE BRASILEIRA DE MICROSCOPIA E MICROANÁLISE. Página web.
www.sbmm.org.br/galeria_0001.htm
- SOUSA, R. M. (2004) – *Modelagem acoplada hidro-mecânica da perfuração de poços em rochas frágeis*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 112.
- TERZAGHI, K. (1936) – *The shearing resistance of saturated soils and the angle between the planes of shear*. *Proceedings of the 1st International Conference on Soil Mechanics and Foundation Engineering*, Vol. 1, 54-56.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)