

# Procesos geoquímicos inducidos por el efecto combinado del calor y la hidratación de bentonitas compactadas

## Geochemical processes caused by the combined effect of heat and hydration in compacted bentonites

ANA VÁZQUEZ, RICARDO JUNCOSA, JAVIER SAMPER, LUIS MONTENEGRO  
Y JORDI DELGADO.

## INTRODUCCIÓN

Entre los objetivos del proyecto FEBEX, Full-scale Engineered Barriers Experiments, (Huertas et al., 2000), se encuentra el estudio termo-hidro-geoquímico (THG) del campo próximo de un hipotético almacenamiento de residuos radiactivos de alta actividad (RAA) en rocas graníticas. En el mismo, la barrera de bentonitas juega un papel primordial. Este proyecto consta de varios experimentos: un ensayo denominado '*in situ*' (cuyas dimensiones son similares a las de una unidad de almacenamiento del hipotético repositorio); una maqueta (con dimensiones ligeramente menores a las del '*in situ*'), y diversos estudios de laboratorio dirigidos a complementar el conocimiento sobre el comportamiento de la bentonita obtenido con los dos ensayos de gran escala. Entre estos últimos se encuentra la denominada 'celda termohidráulica CT-23', realizado por CIEMAT (Fernández et al., 1998) y cuya modelización es el objeto de la presente comunicación.

En esta celda, una masa de bentonita compactada y no saturada fue confinada en un cilindro de acero. A través de uno de los extremos del cilindro se procedió a la hidratación forzada (1000 kPa) de la bentonita mientras por el contrario se impuso una temperatura constante de 100 °C. Como resultado del gradiente térmico impuesto y el flujo de agua (inicialmente en desequilibrio químico con la bentonita) se desencadenan una serie de reacciones químicas y fenómenos de transporte. Tras el experimento, una serie de secciones de la masa de bentonita fueron analizadas, tanto las aguas intersticiales, como el complejo de cambio

de la arcilla. Con estos datos se procedió a la modelización del experimento. La simulación numérica de esta celda se ha llevado a cabo con el código FADES-CORE (Juncosa, 1999, Samper et al., 1999)

### Modelo conceptual

El modelo THG aplicado a este experimento considera 10 componentes químicos ( $H_2O$ ,  $H^+$ ,  $Na^+$ ,  $K^+$ ,  $Ca^{+2}$ ,  $Mg^{+2}$ ,  $HCO_3^-$ ,  $Cl^-$ ,  $SO_4^{2-}$ , y  $SiO_{2(aq)}$ ) y las correspondientes especies acuosas, fases minerales (calcita, calcedonia y anhidrita) y gases. El modelo tiene en cuenta de forma simultánea los procesos de especiación acuosa, disolución/ precipitación de minerales, intercambio catiónico y equilibrio con gases. Entre los procesos de flujo considerados como relevantes en la arcilla compactada y no saturada se encuentran el flujo advectivo de agua líquida, flujo advectivo y difusivo del vapor de agua; flujo advectivo y difusivo de gases distintos al vapor de agua, el flujo advectivo de aire en disolución en el agua, así como los procesos de evaporación y condensación. Los procesos de transporte de solutos considerados son la advección, difusión molecular y la dispersión mecánica.

### Modelo numérico

El modelo realizado es 1-D. La secuencia de acontecimientos simulada consta de las siguientes etapas. Una vez montada la celda, se inicia su calentamiento por la parte superior hasta alcanzar una temperatura de 100° C. Por el extremo inferior se introduce agua a una presión de 1000 KPa sin dejar salir gas. El gas se encuentra inicialmente a presión atmosférica y a

una temperatura de 20° C. Por el extremo inferior se introduce agua destilada. El contorno superior es impermeable al líquido y al gas. El contorno inferior se supone impermeable al gas. Las concentraciones iniciales de los componentes han sido recalculados a partir de análisis suministrados por CIEMAT (Fernández et al., 1998). La calibración del modelo termo-hidráulico se ha realizado mediante ajustes de la permeabilidad intrínseca del líquido y el gas, a partir del volumen total de agua que ha entrado (486 cm<sup>3</sup>) y el contenido de humedad una vez acabado el experimento. El contenido gravimétrico inicial de agua es de 11.23%.

## Resultados

Las figuras 1 (A,B,C,D) muestran la evolución espacial del Cl<sup>-</sup>, Ca<sup>+2</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> y

pH en las distintas secciones de la celda analizadas. La entrada de agua por la parte inferior de la celda (a la izquierda en las figuras) produce la dilución de los contenidos iniciales de Cl<sup>-</sup>, Ca<sup>+2</sup> y HCO<sub>3</sub><sup>-</sup>. La concentración de estas especies al principio del experimento aumentan cerca del calentador (a la derecha en las figuras) dado que el agua intersticial de la bentonita se evapora ahí. Con la llegada del frente de hidratación a esa zona, las elevadas concentraciones alcanzadas disminuyen ostensiblemente. El HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> (figura C), tras la disminución en su concentración inicial debido a la entrada de agua, aumenta después hasta alcanzar un máximo, determinado por la solubilidad de la calcita y el equilibrio simultáneo con el complejo de cambio de la bentonita. Ello también tiene su efecto sobre el perfil final de pH (figura D).

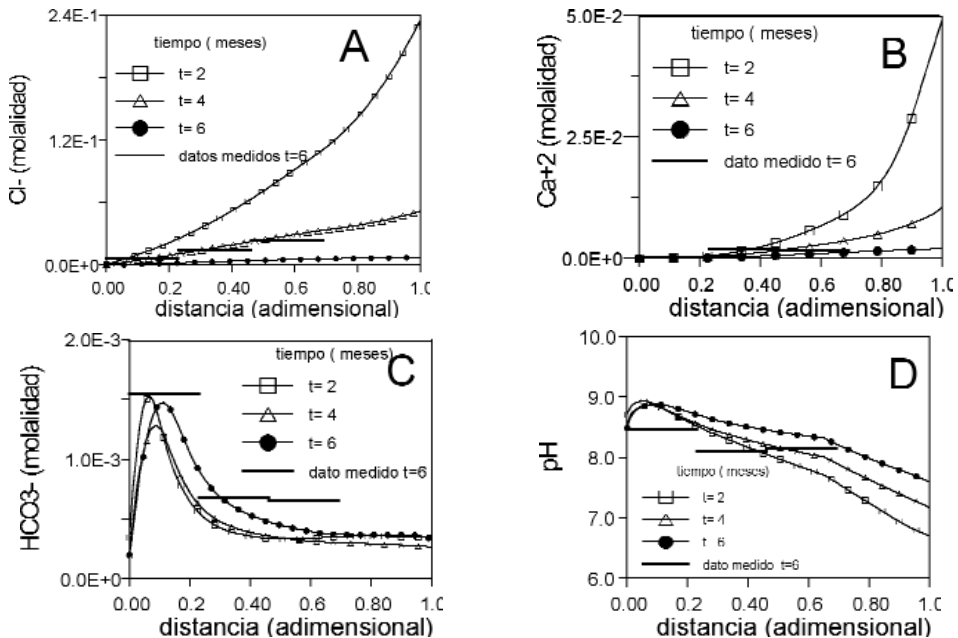


Figura 1 (A,B,C,D)- Distribución espacial para las especies Cl<sup>-</sup>, Ca<sup>+2</sup>, HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> y pH respectivamente

Los resultados de la modelización reproducen satisfactoriamente las tendencias observadas en los datos experimentales. Una explicación más detallada de los resultados obtenidos se encuentra en Samper et al. (1999).

### Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado con fondos de la Unión Europea (FI4W-CT95-0006) y a través de un convenio marco entre ENRESA y la Universidade da Coruña (Proyecto FEBEX, código 703231).

### BIBLIOGRAFÍA

- FERNÁNDEZ ET AL. (1998) *Estudio del agua intersticial de la arcilla FEBEX*. Informe Técnico FEBEX. 70-IMA-L-0-44.
- HUERTAS ET AL. (2000) *Full-scale engineered barriers experiment for a deep geological repository for high-level radioactive waste in crystalline host rock (FEBEX Project)*. EUR 19147EN.
- JUNCOSA, R. (1999) *Modelos de flujo multifásico no isoterma y de transporte reactivo multicomponente en medios porosos*. Tesis doctoral. Universidad de La Coruña. 344 pp.
- SAMPER ET AL. (1999) *Modelización THG del Proyecto FEBEX. Informe final de proyecto FEBEX*. 70-ULC-M-5-001. ETSICCP. UDC.