

**Simulación de procesos geoquímicos inducidos  
por el calor y la radiación en la arcilla  
de Boom (Bélgica)**

**Simulation of geochemical processes due to  
heat and radiation in the Boom Clay  
(Belgium)**

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

## Resumen

La acción combinada del calor y la radiación influyen en los procesos geoquímicos de cualquier sistema. El experimento CERBERUS (Control Experiment with Radiation of the BELgian Repository for Underground Storage) se desarrolló con el fin de estudiar la influencia de estos procesos sobre las arcillas de Boom. La duración del experimento fue de cinco años durante los cuales se tomaron muestras de arcilla y de agua intersticial. Con los datos disponibles se estableció un modelo hidroquímico y de transporte reactivo con equilibrio químico. También se estableció un modelo geoquímico estático (sin transporte) teniendo en cuenta la cinética de disolución/precipitación de minerales. Estos dos modelos se resolvieron con los códigos CORE<sup>2D</sup> (Samper et al., 1999) y EQ3/6 (Wolery, 1979), respectivamente. Los resultados numéricos obtenidos indican que los códigos disponibles reproducen satisfactoriamente las tendencias del experimento y que, en este caso particular, la cinética no mejora significativamente los resultados obtenidos con CORE<sup>2D</sup>.

## Introducción

El experimento CERBERUS (Noynaert et al., 2000) simula los efectos que produciría el enterramiento de un contenedor de residuos radiactivos de alta actividad tras un período de tiempo de 50 años en el entorno de una formación arcillosa (arcilla de Boom). Para ello se utilizó una fuente radioactiva de <sup>60</sup>Co de 400 TBq y dos calentadores eléctricos de 363 W de potencia cada uno. La duración del experimento

fue de 5 años (1989-1994). Durante este tiempo se obtuvieron datos de temperatura, presión intersticial, composición de agua intersticial, dosis de radiación, pH, Eh, gases producidos por radiólisis y corrosión (H<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub>) y mineralogía.

## Modelo conceptual

Las principales características e hipótesis de los modelos utilizados son: (1) La arcilla de Boom permanece siempre saturada. (2) Los procesos químicos considerados incluyen la disolución/precipitación de minerales, la especiación acuosa, redox, intercambio iónico y equilibrio con gases. (3) El sistema químico está formado por los siguientes componentes; H, O, Na, K, Ca, Mg, Fe, C, Cl, S, B, F y Si. En el modelo estático se considera además el Al. (4) En el modelo de transporte reactivo se utilizan calcita, siderita, cuarzo, pirita y goethita mientras que en el modelo estático de no equilibrio se considera illita, albita, caolinita, calcedonia, feldespato potásico, dolomita y pirita con control cinético y calcita, siderita y goethita con equilibrio químico. (5) La radiólisis del agua se considera en ambos modelos. (6) El proceso de transporte considerado en el modelo de transporte reactivo es la difusión molecular.

## Metodología

Las condiciones iniciales de ambos modelos se generaron a partir de los datos hidroquímicos y mineralógicos disponibles para la arcilla de Boom antes de comenzar el experimento. Estas condiciones químicas fueron el punto de partida

del modelo de transporte reactivo y del estático de no equilibrio. La modelización se realizó con los códigos CORE<sup>2D</sup> y EQ3/6. Los resultados numéricos obtenidos con ambos códigos se compararon con los datos hidroquímicos medidos durante y al final del experimento. La figura 1 presenta un detalle del dispositivo de muestreo, en el que se mide el pH y Eh, y se recoge agua de la arcilla para su posterior análisis químico. Cabe resaltar la importancia de tomar la muestra de agua antes o después de los electrodos de pH/Eh debido a problemas de contaminación (disolu-

ción del vidrio del electrodo, pérdida de KCl del puente salino, etc).

Resultados numéricos

Las figuras 2-4 muestran la comparación entre los valores medidos y los resultados numéricos obtenidos con ambos modelos para el pH, Ca y K en el piezómetro en el que se toman las muestras de agua. Una explicación detallada de los procesos geoquímicos que se producen en la arcilla de Boom por efecto del calentamiento y oxidación se encuentra en Delgado et al. (1999) y Noynaert et al. (2000).

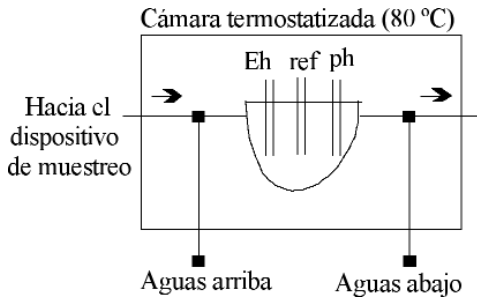


Figura 1. Dispositivo de muestreo

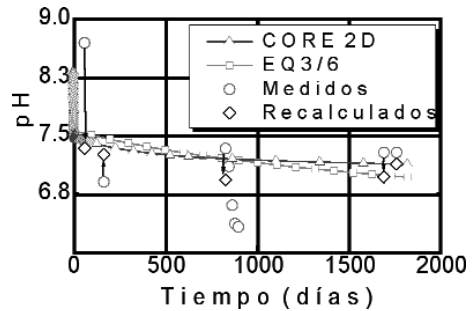


Figura 2. Evolución temporal del pH

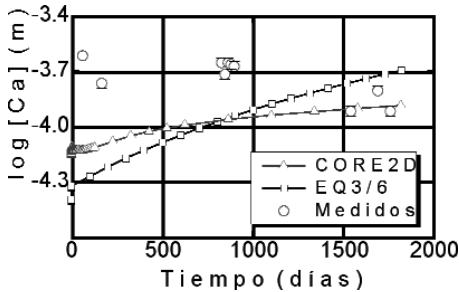


Figura 3. Evolución temporal del calcio

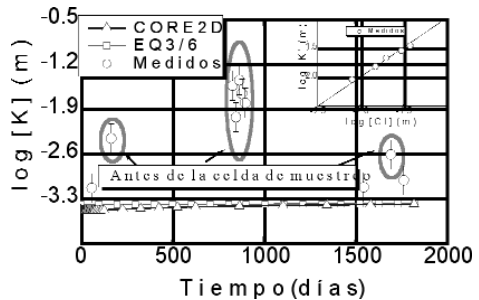


Figura 4. Evolución temporal del potasio

Conclusiones

Se pone de manifiesto la importancia de la revisión crítica de los datos experi-

mentales utilizados en la modelización numérica (condiciones iniciales y comparación). Los resultados que se obtienen con el modelo de transporte reactivo reprodu-

cen satisfactoriamente la mayoría de las tendencias de los datos experimentales. Estos resultados no mejoran con el modelo estático de no equilibrio que considera la cinética para la disolución/precipitación de minerales.

### Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la Comisión Europea (proyecto FI4W-CT95-0008) y la Xunta de Galicia (proyecto XUGA 11802B98).

### BIBLIOGRAFÍA

- DELGADO, J., MONTENEGRO, L., SAMPER, J., VÁZQUEZ, A., JUNCOSA, R. (1999). *Reactive solute transport modeling of thermally-perturbed and irradiated Boom Clay. En Geochemistry of the Earth's Surface*. Editado por H. Armannsson, Balkema, Rotterdam, 445-448. ISBN: 90 5809 073 6.
- NOYNAERT, L., DE CANNIÈRE, P., DE BRUYN, D., VOLCKAERT, G. PUT, M., KURSTEN, B., SNEYERS, A., VAN ISEGHEM, P., BEAUCAIRE, C., PITSCH, H., BOUCHET, A., PARNEIX, J.C., SAMPER, J., DELGADO, J., NAVARRO, V., MONTENEGRO, L., ZHANG, G. (2000). *Heat and radiation effects on the near field of a HLW or spent fuel repository in a clay formation (Cerberus project)*. Informe EUR 19125 EN. 157 pp. ISBN: 92-828-8913-0.
- SAMPER, J., JUNCOSA, R., DELGADO, J. Y MONTENEGRO, L. (1999). *A code for non-isothermal water flow and reactive solute transport. User's Manual. Version 2*. E.T.S. Ingenieros de Caminos, Universidad de A Coruña.
- WOLERY, T.J. (1979). *Calculation of chemical equilibrium between aqueous solution and minerals: The EQ3/6 software package*. Report UCRL-52658. Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California.