

MODELOS DE TRANSPORTE REACTIVO PARA ANALIZAR LAS INTERACCIONES GEOQUÍMICAS EN INTERFACES HETEROGÉNEAS EN MEDIOS POROSOS Y FRACTURADOS

Javier Samper¹, Alba Mon¹, Luis Montenegro¹, Acacia Naves¹, Bruno Pisani¹, Brais Sobral¹, Jesús F. Águila²

¹Centro de Investigaciones Científicas Avanzadas, ETS Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos, Universidad de A Coruña, Campus Elviña s/n, 15071 A Coruña. j.samper@udc.es

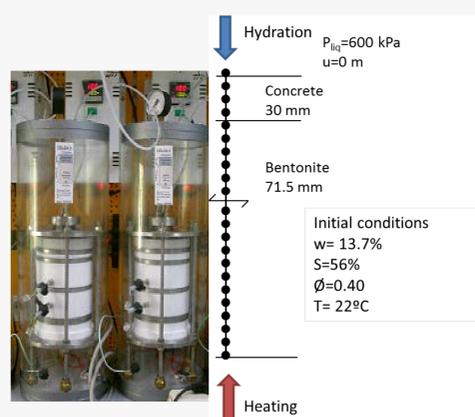
² School of Nature and Built Environment, Queen's University Belfast (Irlanda) J.FernandezAguila@qub.ac.uk

1. INTRODUCCIÓN

- Los modelos de flujo y transporte reactivo en medios porosos y fracturados son herramientas sofisticadas que permiten realizar análisis y predicciones de la calidad de las aguas de la migración de contaminantes en suelos y acuíferos.
- Las zonas más reactivas se suelen presentar en las interfaces de materiales con diferentes propiedades físicas y geoquímicas.
- Las propiedades del medio poroso (porosidad, conductividad hidráulica, difusión molecular, superficie específica) pueden variar como consecuencia de las reacciones de disolución/precipitación de minerales.
- La porosidad puede llegar a anularse si se produce la obstrucción de los poros (*pore-clogging*).

3. MODELO DE TRANSPORTE REACTIVO DEL ENSAYO DE LA CELDA HB4

- En el ensayo se estudia la interfaz bentonita/hormigón durante la fase de hidratación y calentamiento de la barrera de bentonita.
- El ensayo está compuesto por 7.15 cm de bentonita y 3 cm de hormigón (Turrero et al., 2011). La duración del ensayo es 4.5 años.
- El modelo numérico se desarrolla con una malla de elementos finitos 1D (Samper et al., 2018).

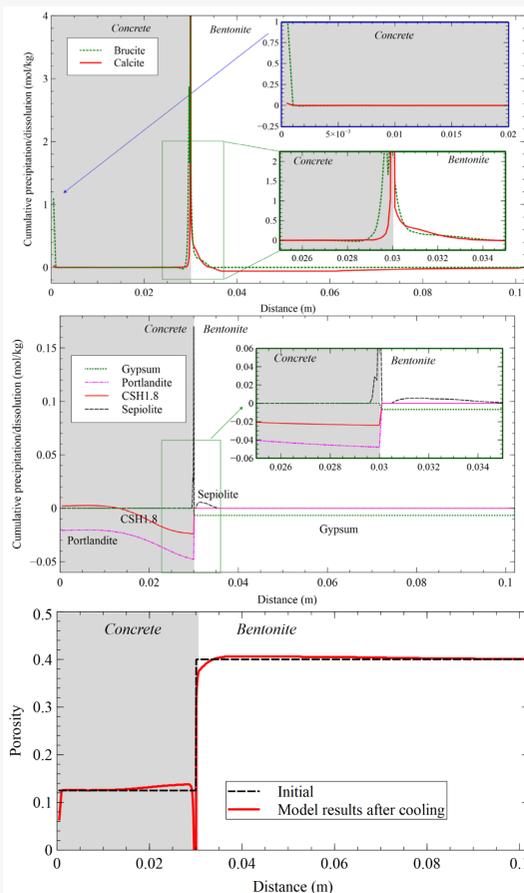


- Las observaciones de laboratorio indican que:

- La calcita y brucita precipitan en el hormigón cerca del borde de hidratación.
- La portadita se disuelve y la calcita y ettringita precipitan en el hormigón.
- La calcita y la sepiolita precipitan en la bentonita cerca de la interfaz bentonita/hormigón.

- El modelo reproduce la tendencias generales de la evolución geoquímica, sin embargo no reproduce las observaciones experimentales de precipitación de ettringita.

- Los mayores cambios en la porosidad se localizan en el hormigón cerca del borde de hidratación y en la interfaz bentonita/hormigón, debido principalmente a la precipitación de brucita y calcita.



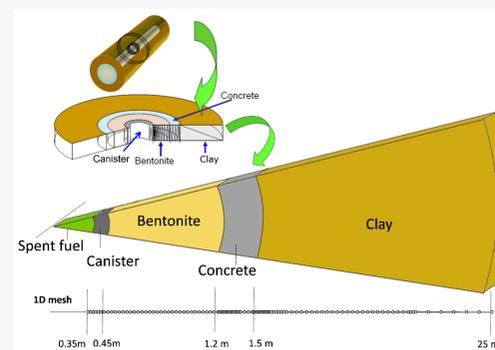
Referencias

- Águila J.F., Samper J., Mon A., Montenegro L., 2020. Dynamic update of flow and transport parameters in reactive transport simulations of radioactive waste repositories. *Applied Geochemistry* 117, 104585
- Mon, A., 2017. Coupled Thermo-hydro-chemical-mechanical Models for the Bentonite Barrier in a Radioactive Waste Repository. Ph. D. Dissertation. Universidad de A Coruña, Spain.
- Mon, A., Samper, J., Montenegro, L., Naves, A., Fernández, J., 2017. Long-term non-isothermal reactive transport model of compacted bentonite, concrete and corrosion products in a HLW repository in clay. *J. Contam. Hydrol.* 197, 1–16.
- Samper J., Mon A., Montenegro L., Cuevas J., Turrero M.J., Naves A., Fernández R., Torres E. (2018). Coupled THCM model of heating and hydration concrete-bentonite column tests. *Applied Geochemistry* 94, 67-81.
- Turrero, M.J., M.V. Villar, E. Torres, A. Escribano, J. Cuevas, R. Fernández, A.I. Ruiz, R. Vigil de la Villa, I. de Soto, 2011. Laboratory tests at the interfaces: First results on the dismantling of tests FB3 and HB4. Deliverable D2.3-3-1 of the PEBS Project.

2. OBJETIVOS

- Recopilar las formulaciones propuestas en la literatura que relacionan los parámetros físicos, de flujo y de transporte con la porosidad para considerar de forma realista la variación temporal de las propiedades físicas en las interfaces (feedback de la porosidad y otros parámetros).
- Actualizar y mejorar las ecuaciones constitutivas que relacionan los parámetros físicos, de flujo y de transporte con la porosidad.
- Implementar las mejoras en los códigos de la serie CORE desarrollados por la UDC.
- Verificar con otros códigos de transporte reactivo y aplicar las mejoras conceptuales y numéricas introducidas en CORE2D v5.

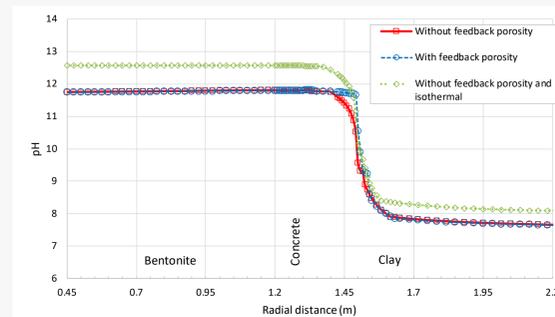
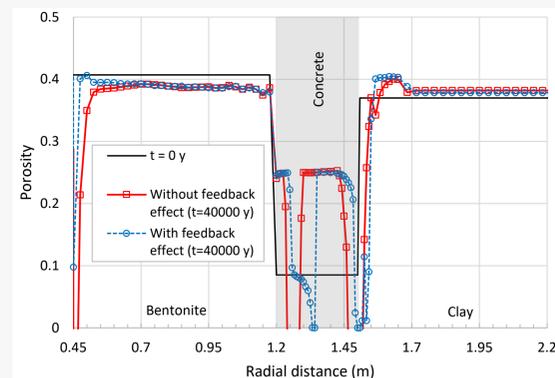
4. SIMULACIÓN PREDICTIVA DE LA EVOLUCIÓN GEOQUÍMICA EN UN ALMACENAMIENTO GEOLÓGICO DE RESIDUOS RADIATIVOS MEDIANTE UN MODELO DE TRANSPORTE REACTIVO



- El modelo de transporte reactivo se basa en el sistema de referencia español para el concepto multibarrera del almacenamiento de residuos radiactivos en una roca arcillosa.
- El dominio se discretiza con una malla de elementos finitos 1D que tiene en cuenta el contenedor metálico, la barrera de bentonita, el sostenimiento de hormigón y la formación arcillosa (Mon et al. 2017).

- Los resultados de las simulaciones (Águila et al., 2020) indican que:

- Existen diferencias considerables en las tasas de disolución/precipitación calculadas considerando o no el efecto de las variaciones de la porosidad
- El efecto de la obstrucción de los poros es menor cuando se tiene en cuenta el efecto de la retroalimentación.
- Es necesario usar mallas con una discretización espacial suficientemente fina para reducir la dispersión numérica.
- El pH calculado es muy sensible a la consideración o no del efecto de la variación de la porosidad.
- El pH es muy sensible a considerar o no las variaciones espacio-temporales de la temperatura.



Agradecimientos

Este trabajo se ha realizado en el marco del Proyecto PID2019-109544RB-I00 de los programas estatales de generación de conocimiento y fortalecimiento científico y tecnológico del sistema de I+D+I y de I+D+I orientada a los retos de la sociedad y al programa de "Consolidación y Estructuración de Unidades de Investigación Competitivas Grupos de Referencia Competitiva" de la Xunta de Galicia (Ref. ED431C 2017/67).

