

Modelos conceptuales y numéricos de flujo y transporte de solutos en zonas de fractura: aplicación a la isla de Äspö (Suecia)

J. Molinero y J. Samper

E.T.S. Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos. Universidad de A Coruña. Campus de Elviña s/n. 15192 A Coruña.
E-mails: molinero@iccp.udc.es - jsc@iccp.udc.es

RESUMEN

El almacenamiento geológico profundo (AGP) en formaciones graníticas es la opción seleccionada por varios países para la gestión definitiva de los residuos radiactivos de alta actividad. Para evaluar el comportamiento y la seguridad de dichos almacenamientos se requiere disponer de modelos conceptuales y numéricos robustos, que contemplen simultáneamente el flujo del agua subterránea, el transporte de solutos, las reacciones químicas y los procesos radiológicos en el medio subterráneo. Estos modelos se desarrollan a partir del conocimiento y los datos obtenidos en experimentos *in situ* realizados en laboratorios subterráneos como el de la isla de Äspö en Suecia. El Experimento de la Zona Redox es uno de estos ensayos de campo que se realizó en el macizo granítico de la isla de Äspö para evaluar el impacto producido por la construcción del túnel de acceso al laboratorio subterráneo sobre las condiciones hidrogeológicas y hidroquímicas de una zona de fractura intersecada por dicha excavación. Los datos hidroquímicos e isotópicos del experimento fueron interpretados por otros autores utilizando una descripción cualitativa del funcionamiento hidrogeológico de la zona. Esta interpretación, sin embargo, introduce una serie de incertidumbres relacionadas con la excesiva simplificación del modelo conceptual hidrogeológico utilizado. En el presente trabajo se presentan varios modelos numéricos de flujo y transporte de solutos en la zona de fractura del experimento de la Zona Redox de Äspö. El primero de ellos se basa en un modelo conceptual previo. Este modelo presenta diversas inconsistencias. Además, sus resultados no reproducen simultáneamente las medidas de campo de niveles piezométricos y concentraciones de cloruro disuelto en las aguas subterráneas. Por ello, se revisó el modelo conceptual hidrogeológico de la zona, utilizando para ello toda la información y los datos hidrodinámicos y de transporte de solutos disponibles en el laboratorio subterráneo. Con el modelo conceptual revisado se elaboró un nuevo modelo numérico que, no sólo es capaz de reproducir los datos hidrogeológicos y hidroquímicos anteriores a la construcción del túnel, sino que además reproduce simultáneamente las evoluciones de los descensos del nivel piezométrico y de las concentraciones de cloruros en las condiciones alteradas por la excavación del túnel. Los resultados obtenidos permiten concluir que para realizar análisis cuantitativos adecuados de la información hidroquímica es necesario apoyarse en modelos conceptuales hidrogeológicos robustos. La modelización numérica del flujo y transporte de solutos constituye una valiosa herramienta para comprobar la coherencia existente entre los datos hidrodinámicos e hidroquímicos.

Palabras clave: flujo de agua subterránea, granitos, Hidrogeología, modelos numéricos, transporte de solutos, túnel de Äspö, zonas de fractura

Conceptual and numerical models of groundwater flow and solute transport in fracture zones: Application to the Äspö island (Sweden)

ABSTRACT

Several countries around the world are considering the final disposal of high-level radioactive waste in deep repositories located in fractured granite formations. Evaluating the long term safety of such repositories requires sound conceptual and numerical models which must consider simultaneously groundwater flow, solute transport and chemical and radiological processes. These models are being developed from data and knowledge gained from *in situ* experiments carried out at deep underground laboratories such as that of Äspö, Sweden, constructed in fractured granite. The Redox Zone Experiment is one of such experiments performed at Äspö in order to evaluate the effects of the construction of the access tunnel on the hydrogeological and hydrochemical conditions of a fracture zone intersected by the tunnel. Previous authors interpreted hydrochemical and isotopic data of this experiment using a mass-balance approach based on a qualitative description of groundwater flow conditions. Such an interpretation, however, is subject to uncertainties related to an over-simplified conceptualization of groundwater flow. Here we present numerical models of groundwater flow and solute transport for this fracture zone. The first model is based on previously published conceptual model. It presents noticeable inconsistencies and fails to match simultaneously observed drawdowns and chloride breakthrough curves. To overcome its limitations, a revised flow and transport model is presented which relies directly on available hydrodynamic and transport parameters, is based on the identification of appropriate flow and transport boundary conditions and uses, when needed, solute data extrapolated from nearby fracture zones. A significant quantitative improvement is achieved with the revised model because its results match simultaneously drawdown and chloride data. Other improvements are qualitative and include: ensuring consistency of hydrodynamic and hydrochemical data and avoiding inconsistencies in the

hydrodynamic model. These results enable us to conclude that quantitative analyses of hydrochemical data should rely on sound conceptual and numerical flow and transport models. Coupled models of groundwater flow and solute transport are useful tools for checking the consistency of hydrodynamic and hydrochemical data.

Key words: Åspö tunnel, fracture zones, granites, groundwater flow, Hydrogeology, numerical models, solute transport

Introducción

El almacenamiento geológico profundo (AGP) en formaciones graníticas es la opción considerada por varios países como la más segura para los residuos radiactivos de alta actividad. El concepto de AGP consta de un sistema de barreras múltiples en serie, de manera que un eventual fallo en una de ellas tendría una influencia limitada en el funcionamiento global y la seguridad del AGP en su conjunto. La formación geológica que alberga el AGP se conoce como la Barrera Geológica o Natural. El concepto de referencia para el AGP que se contempla en España y otros países considera el almacenamiento final de los residuos en galerías horizontales excavadas en formaciones graníticas a una profundidad del orden de 500 m. Se contempla un relleno de bentonita compactada entre los contenedores de residuos y la roca. Esta barrera bentonítica es conocida como la Barrera de Ingeniería. El concepto sueco de AGP para los residuos radiactivos provenientes del combustible gastado de las centrales nucleares contempla que los residuos serán encapsulados en contenedores de cobre depositados a 500 m de profundidad en pozos verticales (SKB, 1995). Las instalaciones subterráneas se ubicarán en función de las zonas de fractura que se detecten durante los trabajos de caracterización del medio subterráneo. El flujo del agua subterránea y el transporte de solutos a través del granito fracturado es un factor clave para el diseño de un AGP, puesto que la migración de los solutos a través de la formación granítica constituye la vía de conexión de los residuos con la biosfera.

El Laboratorio Subterráneo de Åspö (Åspö HRL) es un prototipo a escala real de un AGP en granitos. La instalación subterránea es gestionada por SKB, la agencia sueca para la gestión de los residuos radiactivos. El Laboratorio Subterráneo de Åspö aporta la infraestructura necesaria para la realización de actividades de investigación, desarrollo y demostración, en condiciones reales, de un futuro AGP en formaciones graníticas (SKB, 1996). El Laboratorio de Åspö está situado en el sureste de Suecia, 400 km al sur de Estocolmo. La instalación subterránea consta de un túnel de 3.600 m de longitud con una rampa de acceso y una parte final en espiral que alcanza los 450 m de profundidad bajo la superficie de la isla de Åspö

(Figura 1). La parte final del túnel está conectada con las instalaciones superficiales (oficinas y laboratorios) por medio de pozos verticales el ascensor y la ventilación (Figura 1).

En marzo de 1991 el túnel de acceso del laboratorio intersecó una zona de fractura vertical, a una profundidad de 70 m bajo el nivel del mar. Esta zona de fractura se conoce como la Zona Redox del Laboratorio Subterráneo de Åspö. Previamente a la intersección de la Zona Redox por el túnel del laboratorio se perforó un sondeo para muestrear el agua subterránea de la zona de fractura en condiciones naturales, justo en la posición que sería posteriormente intersecada por el túnel. Estas muestras de agua sirven de referencia para comparar la evolución hidroquímica posterior producida por la construcción del túnel. Tras el paso del túnel por dicho punto de intersección se dio por comenzado el Experimento de la Zona Redox, cuyo objetivo consistió en el estudio y evaluación a largo plazo de la evolución hidrogeológica e hidroquímica de la zona de fractura una vez modificada por la presencia del túnel. La Tabla 1 muestra el calendario de las principales actividades del Experimento de la Zona Redox de Åspö.

Tanto antes como después de la intersección de la zona de fractura se realizó una caracterización muy detallada de la geología, mineralogía, hidrogeología y de las condiciones hidroquímicas, isotópicas y bacteriológicas del agua subterránea. La zona de fractura es prácticamente vertical y fácilmente identificable en las paredes del túnel, donde se muestra como una banda de roca fracturada de 1 m de potencia con una marcada conductividad hidráulica. La Figura 2 muestra las vistas en planta y en perfil de la zona de fractura, con la localización de los sondeos utilizados para el muestreo del agua subterránea durante el Experimento de la Zona Redox.

Los datos del experimento, así como su interpretación aparecen recogidos en Banwart *et al.* (1995). Posteriormente, Banwart *et al.* (1999) presentan un resumen de las principales conclusiones hidroquímicas del Experimento de la Zona Redox. Los autores citados interpretan los datos hidroquímicos e isotópicos utilizando una descripción cualitativa del funcionamiento hidrodinámico del medio subterráneo (Figura 3). Las condiciones hidrogeológicas fueron modificadas por el túnel y posteriormente por uno de

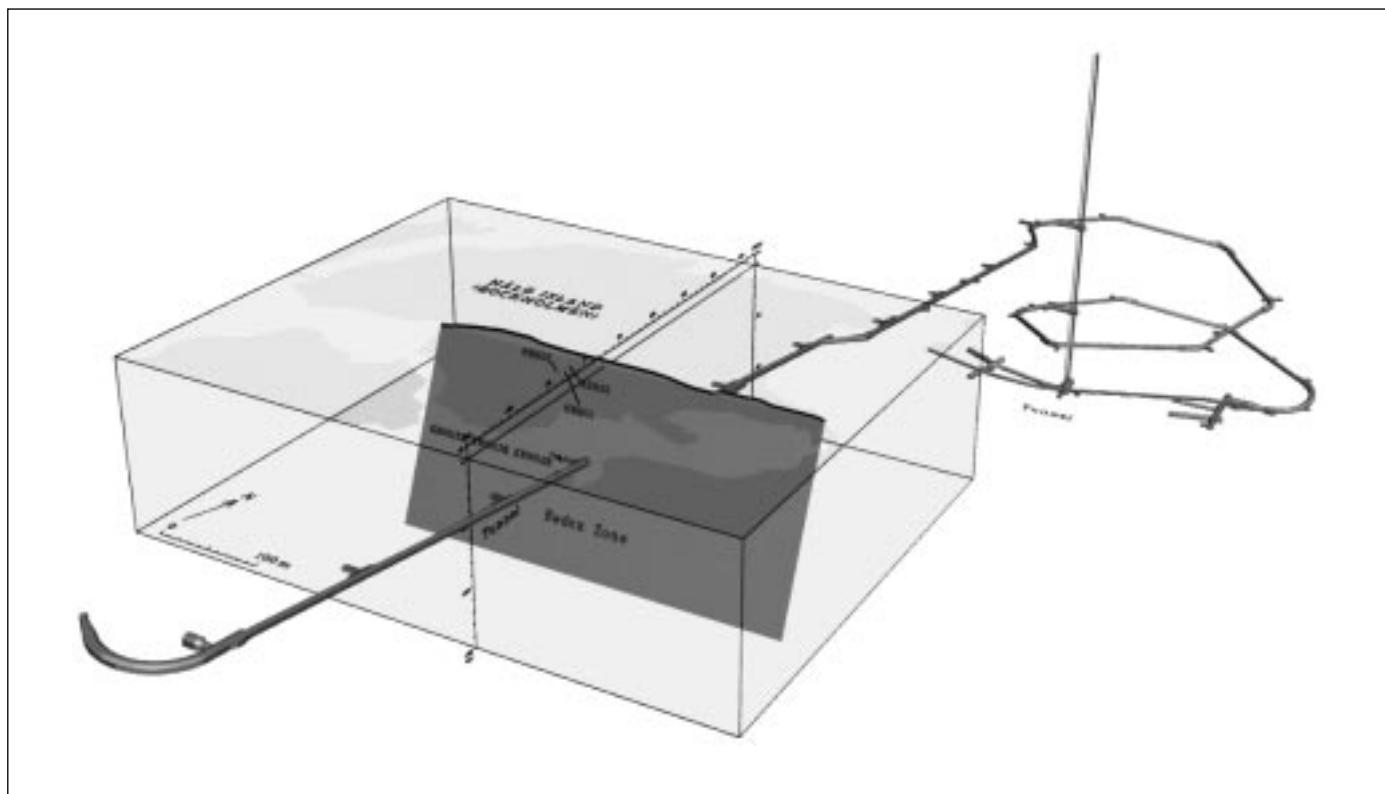


Fig. 1. Vista tridimensional del túnel de Äspö y de la Zona Redox. La rampa de acceso al Laboratorio Subterráneo de Äspö interseca a la zona de fractura a una profundidad de 70 m (figura cedida por la empresa INTERA-Duke)

Fig. 1. Three-dimensional view of the tunnel and the Redox Fracture Zone. The access ramp to the Äspö Underground Laboratory intersects the fracture zone at a depth of 70 m (figure provided by INTERA-Duke Engineering & Services Company)

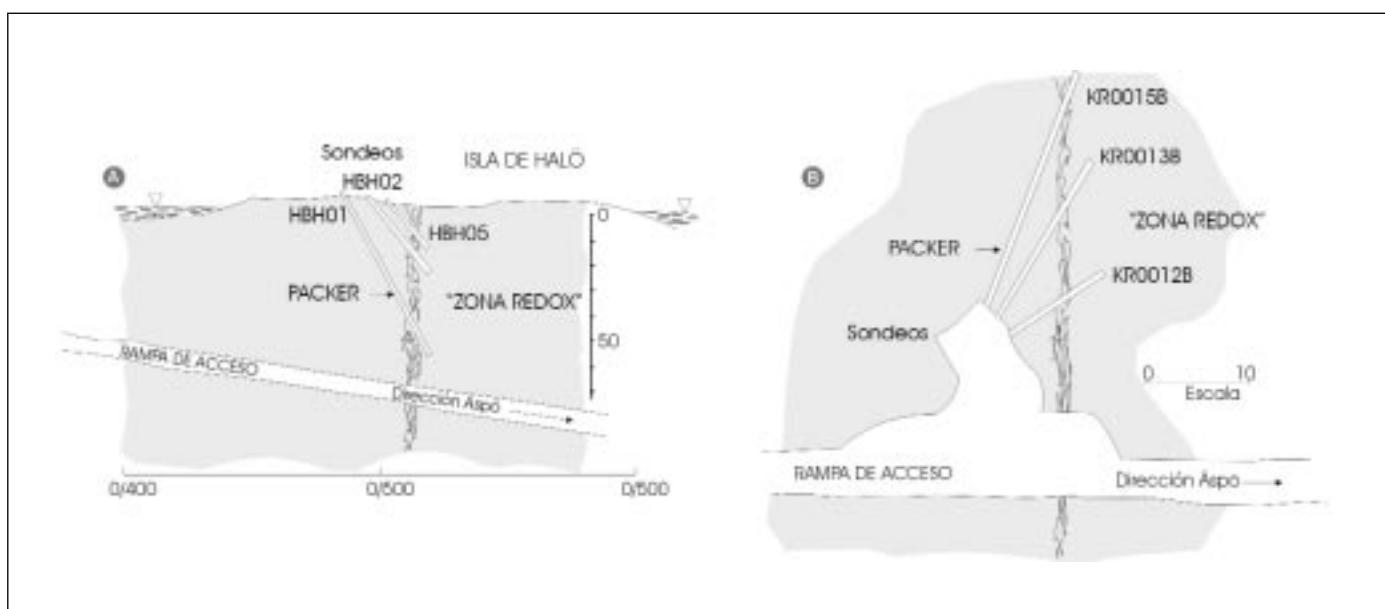


Fig. 2. Vista en perfil y en planta del Experimento de la Zona Redox. A9 Vista en perfil con la situación de los sondeos perforados desde la superficie (HBH01, HBH02 y HBH05). B) Vista en planta con la situación de los sondeos perforados desde el túnel (KR0012B, KR0013B y KR0015B). Modificado de Gustafsson et al. (1994)

Fig. 2. Cross-section and plan view of the Redox Zone Experiment: A) Cross-section view with the location of boreholes drilled from the surface (HBH01, HBH2 and HBH05); and B) Plan view with the location of boreholes drilled from the tunnel at a depth of 70 m (KR0012B, KR0013B and KR0015B). Modified from Gustafsson et al. (1994)

Fecha	Día del experimento	Actividades
20-21 de febrero de 1991	-	Perforación de los sondeos HBH01 y HBH02
9-10 de marzo de 1991	-	Muestreo del agua subterránea nativa a 70 m de profundidad
12-13 de marzo de 1991	0	Intersección de la zona de fractura por el túnel de Äspö
	47-53	Perforación de los 3 sondeos con testigo continuo desde la pared del túnel (sondeos KR0012B, KR0013B y KR0015B)
	93-114; 149-159	Apertura del sondeo KR0012B con un caudal de drenaje de 0.3 L/min
	159	Cierre del sondeo KR0012B y apertura del sondeo KR0013B con un caudal de drenaje de 7-10 L/min
	480	Perforación a percusión del sondeo HBH05, obturado a 5 m de profundidad
11 de noviembre de 1993	983	Fin del experimento

Tabla 1. Calendario resumido de las principales actividades del Experimento de la Zona Redox (Banwart *et al.*, 1995)
 Table 1. Summarized schedule of main events and experimental activities of the Redox Zone Experiment (Banwart *et al.*, 1995)

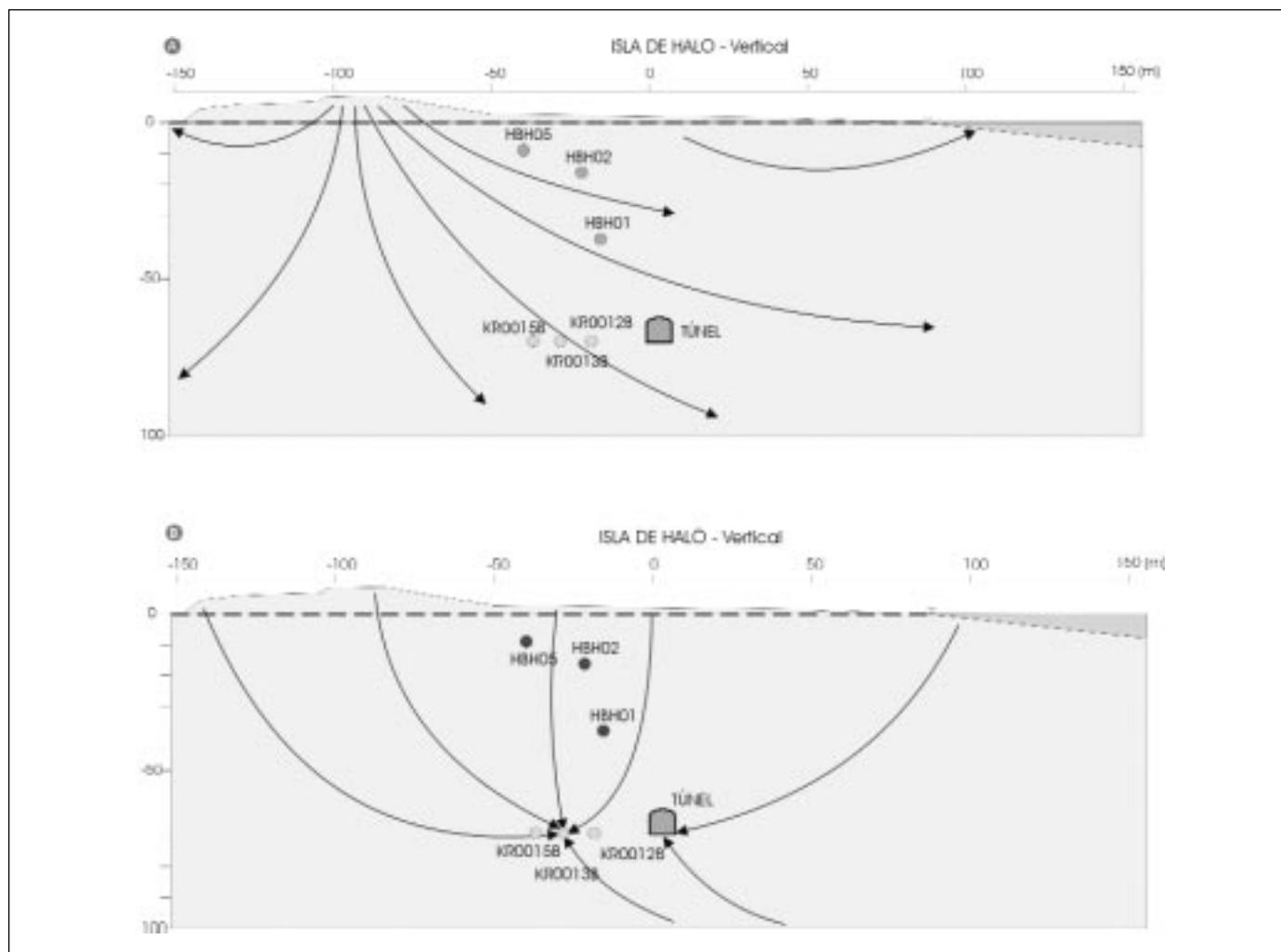


Fig. 3. Modelo conceptual de: A) condiciones inalteradas, antes de la construcción del túnel y B) condiciones alteradas por la presencia del túnel y el sondeo de drenaje. Modificado de Banwart *et al.* (1999)

Fig. 3. Conceptual model of: A) Unaltered conditions before tunnel construction and B) Altered conditions caused by tunnel construction and borehole flowing. Modified from Banwart *et al.* (1999)

los sondeos perforados desde las paredes del túnel (sondeo KR0013B) que fue abierto para actuar como un dren permanente. En las proximidades del túnel, el principal proceso responsable de la evolución hidroquímica de las aguas subterráneas fue la dilución del agua subterránea inicialmente salina debido a la llegada de agua dulce procedente de las zonas más someras de la formación granítica. La mayoría de las especies químicas disueltas registraron una dilución destacable, con la excepción de los bicarbonatos y los sulfatos disueltos, cuyas evoluciones temporales de las concentraciones en el agua mostraron un aumento progresivo, probablemente debido a la existencia de procesos químicos catalizados por el metabolismo microbiano de las poblaciones existentes de forma natural en el medio subterráneo de la isla de Äspö (Zhang, 2001; Molinero *et al.*, 2003a,b; Samper *et al.*, 2003).

Hautojärvi *et al.* (1994) realizaron un modelo numérico preliminar del flujo y el transporte de solutos en la Zona Redox de Äspö. El objetivo de este modelo estaba encaminado a apoyar la interpretación de los datos hidroquímicos del experimento. Los autores adoptaron un dominio homogéneo debido a la falta de parámetros hidrodinámicos en la fecha de realización de dicho trabajo. Dicho modelo numérico tenía en cuenta los efectos de las variaciones de densidad del agua, debido a los cambios de salinidad, en el flujo de agua subterránea. Una de las conclusiones más relevantes del trabajo de Hautojärvi *et al.* (1994) es la constatación de que las variaciones de densidad debidas a los cambios de salinidad del agua tienen un efecto muy poco importante en el flujo del agua subterránea por la zona de fractura. También mostraron que el efecto de las variaciones de densidad en el flujo del agua es prácticamente despreciable incluso a una distancia de 600 metros del túnel.

Las interpretaciones del experimento previas al presente trabajo están afectadas por una serie de incertidumbres relacionadas, fundamentalmente, con una conceptuación excesivamente simplificada del flujo del agua subterránea. De hecho, Banwart *et al.* (1994, 1999) indican que la dilución observada durante el experimento en el entorno del túnel, requiere una aportación de agua dulce mayor a la cantidad de agua de recarga disponible en superficie.

La principal conclusión obtenida con el Experimento de la Zona Redox fue que el oxígeno disuelto en el agua dulce de recarga es consumido en las zonas someras de la formación granítica y, por lo tanto, no alcanza la posición del túnel a 70 m de profundidad (Banwart *et al.*, 1996). Dichos autores proponen el proceso de respiración anaerobia del carbono orgánico disuelto en las aguas subterráneas como el

responsable del aumento de alcalinidad observado durante el experimento. La relevancia de esta conclusión radica en el hecho de que cualquier fuente de carbono orgánico, como por ejemplo la presencia de un suelo edáfico, puede aportar una protección importante contra la penetración de un frente de oxígeno disuelto desde la superficie cuando se construya un almacenamiento subterráneo como los previstos en la actualidad (Banwart *et al.*, 1996).

En el presente trabajo se presentan los modelos numéricos de flujo de agua subterránea y transporte de solutos realizados para la interpretación del Experimento de la Zona Redox. En primer lugar se muestran las principales características y resultados obtenidos con un modelo numérico basado en el modelo conceptual propuesto por Banwart *et al.* (1994 y 1999). Este primer modelo no es capaz de reproducir simultáneamente los descensos de nivel y las evoluciones de los cloruros disueltos medidos durante el experimento. A continuación se describe un modelo alternativo con el que es posible superar las limitaciones citadas anteriormente. El modelo revisado no sólo es coherente con los datos hidrogeológicos medidos en condiciones naturales (antes de construir el túnel), sino que además es capaz de reproducir simultáneamente los descensos y las diluciones de cloruro observadas en diversos puntos tras la construcción del túnel. Finalmente se presentan las principales conclusiones alcanzadas con el trabajo descrito.

Hidrogeología e hidroquímica de la zona Redox

El flujo del agua subterránea en la isla de Äspö está controlado de fundamentalmente por los principales accidentes tectónicos y zonas de fractura (Smellie *et al.*, 1995). La "Zona Redox" es una de las zonas de fractura transmisivas identificadas durante los trabajos de caracterización previos a la construcción del túnel (Rhén *et al.*, 1997). Estas zonas de fractura presentan valores de conductividad hidráulica varios órdenes de magnitud mayores que los de la matriz rocosa adyacente. Molinero *et al.* (2002) realizaron un modelo numérico tridimensional para simular la respuesta hidrogeológica transitoria producida por la construcción del túnel de Äspö. Dichos autores concluyeron que la matriz de roca entre zonas de fractura juega un papel muy poco relevante en el funcionamiento hidrogeológico de la isla de Äspö.

La Zona Redox aflora en la pequeña isla de Halö, que se encuentra situada entre la línea de costa principal y la isla de Äspö (Figura 1). Dicho afloramiento forma una ligera depresión topográfica de 10 m de

anchura y entre 2 y 3 metros de altura. En el fondo de dicha depresión, justo encima de la posición del túnel, aparece una capa de suelo vegetal de 20 cm de espesor que se apoya sobre un estrato de gravas y arenas y un nivel de arcillas glaciares que alcanza hasta el primer metro de profundidad. Por debajo de las arcillas se encuentra un estrato de sedimentos de morrena glaciar que se apoya directamente sobre el macizo granítico fracturado. El contacto entre los sedimentos de morrena y el granito se encuentra a una profundidad que oscila entre 2 y 5 m desde la superficie del terreno (Banwart *et al.*, 1995).

La isla de Halö tiene una topografía muy suave, con una superficie ligeramente ondulada cuyas alturas máximas son de 10 m.s.n.m. La geología se caracteriza por afloramientos de granitos y granodioritas conocidos localmente como los "granitos de Smaland", que pertenecen al Cinturón Porfídico-Granítico Transescandinavo (Banwart *et al.*, 1999).

La topografía a lo largo de la zona de fractura define una cuenca de drenaje de 10.000 m². Teniendo en cuenta que la precipitación media varía entre 500 y 675 mm/año y que la evapotranspiración real es del orden de 500 mm/año, se puede estimar que la escorrentía total oscila entre 50 y 175 mm/año (Banwart *et al.*, 1995). Los modelos regionales de flujo subterráneo de la zona de Äspö indican que la recarga de agua subterránea debe ser del orden del 10-20% de la escorrentía total (Banwart *et al.*, 1995). De esta forma, la recarga de agua subterránea en las zonas de fractura debe oscilar entre 5 y 35 mm/año.

Los registros de los testigos de sondeo indican que el espesor de la Zona Redox decrece con la profundidad, desde los 10 m en superficie hasta alcanzar un espesor de 1 m a una profundidad de 70 m (Banwart *et al.*, 1999). Gustafsson *et al.* (1994) realizaron ensayos hidráulicos de interferencia entre sondeos a partir de cuya interpretación se obtuvieron valores de transmisividad de $4,2 \times 10^{-5}$ m²/s a una profundidad de 45 m y de $1,4 \times 10^{-5}$ m²/s a 70 m. Los valores estimados para el coeficiente de almacenamiento específico oscilan entre 10^{-5} y 10^{-7} m⁻¹. Dichos autores presentan también los principales resultados obtenidos con los ensayos de trazadores realizados en la zona de fractura. Se inyectaron tres trazadores conservativos en los sondeos que cortan la zona de fractura a 5, 15 y 45 m de profundidad. Las llegadas de los trazadores fueron registradas en el sondeo KR0013B, situado a la misma profundidad del túnel y cerca del mismo. Los trazadores confirmaron la existencia de conexión hidráulica entre los puntos de inyección y el punto de descarga. Los tiempos de tránsito obtenidos fueron de 5 días entre 45 y 70 m de profundidad y 30 días entre 15 y 70 m de profundidad. A partir de la

interpretación de las curvas de llegada de trazador, Gustafsson *et al.* (1994) obtuvieron valores de dispersividad longitudinal entre 15 y 20 m y porosidades cinemáticas entre 0,5 y 1 %.

Por encima de la posición del túnel, el nivel freático en condiciones naturales se encontraba aproximadamente a 0,5 m de profundidad desde la superficie del terreno. Posteriormente a la construcción de túnel se observó un ligero descenso en el nivel freático. Según Banwart *et al.* (1994) la zona de fractura permaneció completamente saturada durante toda la duración del experimento.

Tres semanas después de comenzar el experimento, se registró la llegada de un frente abrupto de dilución en la posición del túnel (Banwart *et al.*, 1999). Este hecho quedó patente debido a un descenso muy significativo de las concentraciones de los cloruros y los diversos cationes mayoritarios disueltos en el agua subterránea. Al mismo tiempo, se observó un incremento notable en las concentraciones de bicarbonatos. Pocos días después, las concentraciones de hierro disuelto en el agua del entorno del túnel disminuyeron hasta hacerse prácticamente nulas durante algunas semanas. Tras este breve período de tiempo, las concentraciones de hierro volvieron a aumentar hasta alcanzar un valor estable. Este hecho fue interpretado como resultado de la llegada de un frente de oxidación proveniente desde la superficie (Banwart *et al.*, 1995). 159 días después de la intersección del túnel, se abrió el sondeo KR0013B situado cerca del túnel. Cierto tiempo después se registró una segunda etapa de dilución, aunque menos pronunciada que la dilución inicial. La Figura 4 muestra la evolución temporal de las concentraciones de cloruro medidas en el sondeo KR0015B a 70 m de profundidad (la misma profundidad que el túnel).

Modelo conceptual hidrogeológico en base a los datos hidroquímicos

En este modelo conceptual se supone que el sistema de flujo de agua subterránea en la Zona Redox es bidimensional y está contenido en el plano vertical de la zona de fractura. Según Banwart *et al.* (1995; 1999), en condiciones naturales el agua subterránea fluye por la zona de fractura desde las zonas con mayor altura topográfica hacia las zonas de descarga en el mar Báltico y en algunas zonas pantanosas (Figura 3).

Durante el Experimento de la Zona Redox se realizó un muestreo sistemático de las aguas subterráneas en los sondeos de investigación y en las filtraciones de las paredes del túnel. El proceso dominante que controló la evolución hidroquímica de las aguas

subterráneas durante el experimento fue la dilución del agua nativa salina debido a la llegada de agua dulce de recarga. Banwart *et al.* (1995, 1999) calcularon las fracciones de mezcla de agua nativa salina y agua dulce de recarga, a partir de las evoluciones medidas de las concentraciones de cloruros disueltos en muestras de agua tomadas en las proximidades del túnel. Dichas fracciones de mezcla se utilizaron para predecir los valores de δO_{18} de las muestras de agua. En general, Banwart *et al.* (1995, 1999) encontraron que existía un alto grado de coincidencia entre los valores medidos y los calculados a partir de los dos componentes extremos del sistema binario de mezcla. Posteriormente, el modelo de mezcla fue utilizado para predecir las evoluciones de las concentraciones de otros solutos y evaluar el papel de los posibles procesos hidroquímicos. Con la hipótesis de que el contenido en cloruros disueltos del agua nativa salina permanecía constante, Banwart *et al.* (1999) calcularon una dilución media del 83% a la profundidad del túnel.

El modelo conceptual hidrogeológico propuesto por Banwart *et al.* (1999) para el Experimento de la Zona Redox se muestra en la Figura 3. Dicho modelo se idealiza como un sistema de flujo bidimensional en

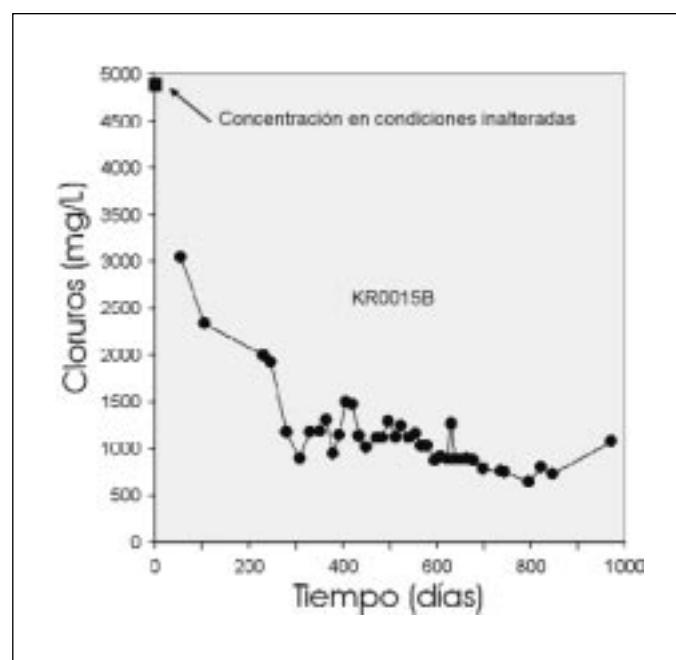


Fig. 4. Evolución de la concentración de cloruros en el sondeo KR0015B. Se puede observar la dilución importante que se produce como resultado de la presencia del túnel y el sondeo de drenaje

Fig. 4. Evolution of measured chloride concentrations at borehole KR0015B showing a strong dilution during the experiment at the tunnel depth (70 m)

el plano vertical, extendiendo el dominio a lo largo de la isla de Hälö (Bockholmen). En dicho modelo tanto el túnel como el sondeo de drenaje actúan como sumideros de agua subterránea generando un sistema de flujo radial convergente (Figura 3). Además, se supone que la zona de fractura permanece completamente saturada durante el experimento. Por último, para la escala adoptada por el modelo conceptual, se supone que los cambios de densidad debidos a las variaciones de salinidad del agua tienen un efecto poco relevante en el flujo (Hautojärvi *et al.*, 1994).

Formulación matemática y primer modelo numérico

Modelo Matemático

El flujo del agua subterránea en la zona fractura satisface la ecuación del flujo en acuíferos:

$$\nabla \cdot (\underline{\mathbf{T}} \nabla h) + r = S \frac{\partial h}{\partial t} \quad (1)$$

donde $\underline{\mathbf{T}}$ es el tensor de transmisividades, S es el coeficiente de almacenamiento, $\nabla(\cdot)$ y $\nabla(\cdot)$ son los operadores divergencia y gradiente, respectivamente, r es el término fuente/sumidero de agua por unidad de superficie, t es el tiempo y h es el nivel piezométrico.

El modelo considera los siguientes procesos de transporte de solutos: advección, dispersión mecánica y difusión molecular. Por lo tanto, bajo estas condiciones, el transporte de solutos obedece la conocida ecuación de advección-dispersión (Bear, 1972):

$$\nabla \cdot (\phi \underline{\mathbf{D}} \nabla c) - q \nabla c + r(c^* - c) = \phi \frac{\partial c}{\partial t} \quad (2)$$

donde c es la concentración de solutos, ϕ es la porosidad, q es la velocidad de Darcy o caudal específico, que viene dado por $q = \underline{\mathbf{K}} \nabla h$ donde $\underline{\mathbf{K}}$ es el tensor de conductividad hidráulica y c^* es la concentración del agua del término fuente/sumidero y $\underline{\mathbf{D}}$ es el tensor de dispersión, que incluye los términos de dispersión y difusión molecular de la siguiente forma:

$$\phi \underline{\mathbf{D}} = D_m \underline{\mathbf{I}} + \underline{\mathbf{D}}_h \quad (3)$$

donde D_m es el coeficiente de difusión efectivo, $\underline{\mathbf{D}}_h$ es el tensor de dispersión hidrodinámica e $\underline{\mathbf{I}}$ es el tensor identidad. Las direcciones principales de $\underline{\mathbf{D}}_h$ coinciden

con las direcciones del flujo y sus normales. La componente de la dispersión a lo largo de la dirección de flujo D_L es el mayor y viene dada por:

$$D_L = \alpha_L |q| \quad (4)$$

donde $|q|$ es el módulo del vector de la velocidad de Darcy y α_L es la dispersividad longitudinal. Las componentes transversales del tensor a lo largo de las direcciones normales al flujo, D_{T_i} vienen dadas por:

$$D_T = \alpha_T |q| \quad (5)$$

donde α_T es la dispersividad transversal.

Las simulaciones de flujo y transporte de solutos se han realizado con CORE^{2D} (Samper *et al.*, 2000), un código de elementos finitos que resuelve las ecuaciones del flujo, transferencia de calor y transporte multicomponente de solutos reactivos en medios total o parcialmente saturados. La integración temporal se realiza por medio de un esquema de diferencias finitas. CORE^{2D} permite trabajar con medios heterogéneos y anisótropos y resolver problemas en condiciones de régimen estacionario o transitorio. Las condiciones de contorno para el flujo de agua subterránea pueden ser de nivel impuesto (Dirichlet), caudal impuesto (Neumann) o tipo mixto (Cauchy). Las

condiciones de contorno para el transporte de soluto pueden ser de: (1) flujo másico impuesto, (2) concentración impuesta y, (3) flujo másico asociado a un flujo de agua con una determinada concentración de solutos.

Modelo numérico

El modelo numérico realizado abarca un dominio de 250 m de longitud y 140 m de profundidad (Figura 5), comenzando ($t = 0$) el 13 de marzo de 1991, cuando el túnel de acceso intersecó la zona de fractura. El plano de la zona de fractura se considera heterogéneo con dos zonas de diferentes valores de sus parámetros hidrodinámicos (Figura 5). La zona más somera tiene una transmisividad mayor que la de la capa más profunda. Los parámetros hidrodinámicos utilizados en el modelo fueron obtenidos de Gustafsson *et al.* (1994) y se muestran en la Figura 5. Los valores de porosidad y dispersividad fueron asignados a partir de las interpretaciones de los ensayos de trazadores realizados por Gustafsson *et al.* (1994). Dichos valores corresponden a una porosidad de 0,01, una dispersividad longitudinal de 25 m y una dispersividad transversal de 5 m para las dos zonas del modelo. La Figura 5 muestra la localización de los puntos de observación utilizados para comparar los datos medidos con los resultados calculados con el modelo numérico.

La Figura 6 muestra la malla de elementos finitos

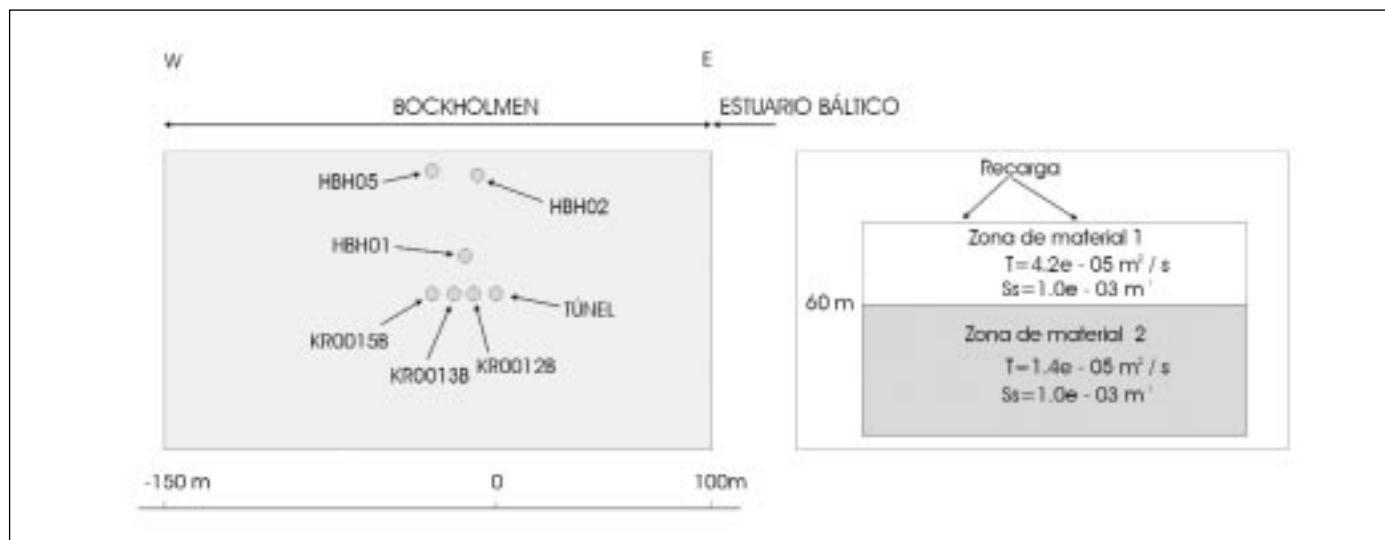


Fig. 5. Dominio del modelo y localización de los puntos de observación utilizados para la calibración del modelo. A la derecha se muestran las zonas de material y los parámetros hidrodinámicos utilizados en el modelo numérico

Fig. 5. Model domain and location of observation points used for calibration (left) and material zones and parameters used in the calibration (right)

utilizada para la discretización espacial del dominio. Dicha malla consta de 1.154 nudos y 2.228 elementos triangulares y fue refinada progresivamente en las proximidades del túnel y del sondeo de drenaje (KR0013B), así como en el entorno del mar Báltico, donde se producen los mayores gradientes de nivel piezométrico y de concentraciones de las especies disueltas. Para resolver la derivada temporal del modelo se utilizaron 900 intervalos de tiempo, con duraciones variables que oscilan entre 0,4 días (para la etapa inicial del experimento) y 2,7 días (en las etapas finales del experimento).

Las condiciones de contorno para el flujo se muestran en la Figura 7. En el contorno superior del modelo se impone una recarga constante de 30 mm/año. En los contornos laterales y en inferior se ha usado la condición de contorno de tipo mixto, o condición Cauchy, según la cual el caudal de agua viene dado por el producto de un coeficiente de goteo y la diferencia de niveles existentes entre la parte interna y la parte externa del contorno en cuestión. Inicialmente se utilizaron coeficientes de goteo muy elevados (del orden de 1.000 días⁻¹). El nivel piezométrico externo se fijó en un valor de 5 m. Tanto el túnel como el sondeo de drenaje se consideran como contornos internos del modelo, imponiendo los valores conocidos de los caudales drenados como condición de contorno en cada punto (0,9 L/min en el túnel y 7,6 L/min en el sondeo). Para simular la apertura del sondeo de drenaje, que se produjo el día 159 tras el comienzo del experimento, se utilizó una función temporal aso-

ciada a la condición de contorno correspondiente (véase Figura 7). Los niveles piezométricos iniciales se obtuvieron resolviendo primero el modelo numérico para el estado estacionario no perturbado, es decir, sin la presencia del túnel y el sondeo de drenaje.

Para las condiciones de contorno de transporte de solutos en el límite superior del modelo se impuso la concentración del agua dulce de recarga excepto en la posición del mar donde se impusieron las concentraciones típicas del agua marina báltica. En el contorno inferior la concentración se mantiene fija e igual al valor del agua nativa profunda. En los contornos laterales se fijan las concentraciones en unos valores iguales a los valores iniciales.

Existen pocos datos para definir las condiciones iniciales de las concentraciones. La información disponible para las condiciones anteriores a la construcción del túnel se resumen en la información química del agua del mar Báltico, los análisis químicos del agua de recarga superficial y dos muestras de agua salina nativa, que fueron recogidas a una profundidad de 70 m antes de la intersección del túnel con la zona de fractura. Es un hecho bien conocido que las acumulaciones del agua dulce debajo de las islas presentan una morfología lenticular, con los espesores máximos localizados debajo de las zonas de máxima recarga (que normalmente coinciden con las zonas topográficamente más elevadas). La zona de transición entre el agua dulce y el agua salada en acuíferos costeros en régimen natural suele ser de poco espesor y, por eso, es habitual idealizarla como una interfaz brusca (Custodio, 1983). Dicha interfaz presenta una forma aproximadamente parabólica, de manera que el espesor de la capa de agua dulce tiende a cero en las proximidades de la línea de costa. A partir de la hipótesis de Dupuit-Forcheimer de suponer que el flujo de agua es horizontal y suponiendo la existencia de una interfaz brusca para el contacto entre el agua dulce y el agua salina, Custodio (1983) deduce una expresión que permite calcular la profundidad de la interfaz:

$$Z^2 = \frac{2q_0x - Wx^2}{K\beta(1+\beta)} \quad (6)$$

donde:

$$\beta = \frac{\gamma_s - \gamma_f}{\gamma_f}$$

Z es la profundidad de la interfaz, q_0 es la velocidad de

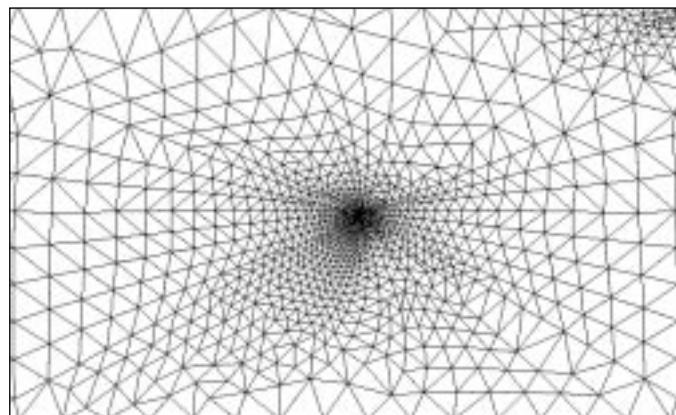


Fig. 6. Malla de elementos finitos triangulares utilizada para la discretización espacial del dominio del primer modelo numérico. La malla se refina en las proximidades del túnel y del mar Báltico, donde se esperan los mayores gradientes de nivel y concentraciones

Fig. 6. *Finite element grid of triangular elements used for spatial discretization of model domain. The grid is refined near the tunnel and the Baltic sea where the largest hydraulic and concentration gradients are expected*

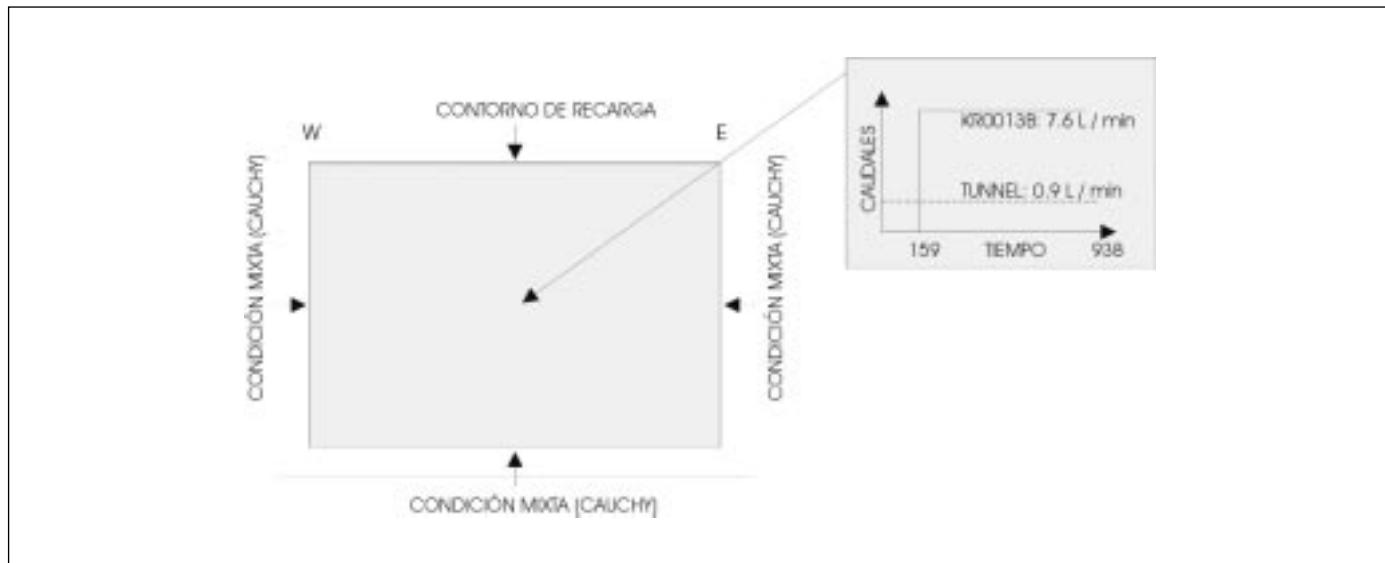


Fig. 7. Condiciones de contorno para el modelo de flujo (izquierda) y funciones temporales para simular el drenaje producido por el túnel y el sondeo abierto (arriba)

Fig. 7. Boundary conditions for groundwater flow (left) and flowrate time functions used in the first numerical model (top)

Darcy del agua dulce en el acuífero, W es la recarga del acuífero, K es la conductividad hidráulica y γ_s y γ_d son los pesos específicos del agua salina y del agua dulce, respectivamente.

Utilizando la interpolación por krigado de la escasa información disponible, Laaksoharju *et al.* (1995) estimaron que la interfaz entre el agua dulce y el agua salina en condiciones naturales en la vertical del túnel se encontraba a una profundidad entre 45 y 70 m. La Figura 8 muestra la posición calculada de la interfaz según la Ecuación 6 y una recarga de 120 mm/año. Esta posición de la interfaz entre el agua dulce y el agua salada es utilizada para generar el campo de concentraciones iniciales de cloruros disueltos en el modelo numérico. Cabe resaltar el hecho de que un valor de recarga de 120 mm/año a lo largo de la zona de fractura corresponde a un valor de 15 mm/año infiltrados en toda la cuenca de drenaje asociada a la depresión que forma el afloramiento de la zona de fractura.

Calibración del modelo

La calibración del modelo numérico del Experimento de la Zona Redox se realizó por medio de la comparación entre los resultados calculados numéricamente y los valores medidos en el laboratorio subterráneo durante el experimento. En concreto, se compararon las evoluciones de los descensos medidos en el sondeo HBH01 (véase Figura 2) y las concentraciones de

cloruros disueltos medidas a lo largo del tiempo en los sondeos HBH01, HBH02, KR0012B y KR0015B (véase Figura 2). A pesar de que fue relativamente sencillo calibrar el modelo por medio del ajuste con los descensos de nivel, no se puede decir lo mismo para el caso de las simulaciones simultáneas de flujo y transporte de solutos. La calibración de los parámetros de flujo permitió reproducir satisfactoriamente los descensos medidos en el sondeo HBH01, pero los valores calculados de concentraciones de cloruros fueron mucho mayores que los valores determinados experimentalmente. Por otra parte, las evoluciones de dichas concentraciones de cloruros se pudieron reproducir reduciendo el valor del coeficiente de goteo del contorno inferior del modelo, puesto que este parámetro controla la cantidad de agua salina que entra en el sistema. Sin embargo, en esta segunda fase de calibración si bien se ajustaban las evoluciones medidas de los cloruros disueltos, los descensos calculados en el sondeo HBH01 resultaron ser muy superiores a los medidos durante el experimento.

Según las estimaciones de Banwart *et al.* (1995, 1999) la recarga de agua dulce en la isla de Hälo, dentro del área de drenaje de la zona de fractura, varía entre 1,0 y 3,3 L/min. Sin embargo, la dilución observada en el entorno del túnel requiere una cantidad de agua dulce considerablemente mayor. Por lo tanto, Banwart *et al.* (1995, 1999) concluyen que debe existir una fuente adicional de agua dulce en el sistema, además de la recarga de agua dulce proveniente de la superficie de la isla de Hälo. Los autores citados pro-

ponen la existencia de "flujos laterales" inducidos por la construcción del túnel. Los resultados del modelo numérico presentado anteriormente son coherentes con las afirmaciones de Banwart *et al.* (1995, 1999) ya que se requiere un aporte adicional de agua dulce para poder reproducir simultáneamente los datos medidos de los descensos de nivel y de las concentraciones de cloruros.

El mejor ajuste entre los resultados del modelo numérico y los datos medidos se obtiene al utilizar una condición de contorno de tipo Dirichlet (nivel impuesto) asociada con una composición química de agua dulce, en las zonas más someras de los contornos laterales del dominio (Figura 9). Esta modificación de las condiciones de contorno permite la entrada de una mayor cantidad de agua dulce que finalmente alcanza "lateralmente" la posición del túnel. De este modo, los resultados del modelo numérico se ajustan mejor a los datos medidos, tanto de nivel piezométrico como de concentraciones de cloruros (Figura 9). Sin embargo, con estas modificaciones el modelo numérico pierde en gran medida su consistencia y credibilidad debido a que requiere suponer la entrada de agua dulce por los contornos en contacto con los estuarios Bálticos. Esta hipótesis es, sin duda, poco realista y debe ser objeto de revisión.

Revisión del modelo conceptual hidrogeológico

Para hacer frente a las limitaciones encontradas en el modelo numérico expuesto anteriormente se decidió realizar una revisión en profundidad del modelo conceptual hidrogeológico del Experimento de la Zona Redox. De forma contraria al modelo conceptual previo, que fue deducido fundamentalmente a partir de información hidroquímica, el modelo conceptual revisado se elaboró a partir de la interpretación conjunta de la información hidrodinámica e hidroquímica. Además, se hizo un especial hincapié en la selección de las condiciones de contorno apropiadas. Como punto de partida de la revisión del modelo conceptual se comenzó por evaluar en detalle la topografía y la geometría del área de estudio.

La Figura 10-A muestra un mapa antiguo de la zona de Åspö donde Bockholmen aparece como una pequeña isla separada de la isla de Hälö. Informes más recientes muestran que Bockholmen y Hälö se encuentran conectados. De hecho, actualmente el sistema formado por Bockholmen y Hälö forma una península conectada con la zona de Simpevarp.

La Figura 10-B muestra una fotografía aérea del área de la Zona Redox, con una línea que indica la traza del afloramiento de la zona de fractura. En esta

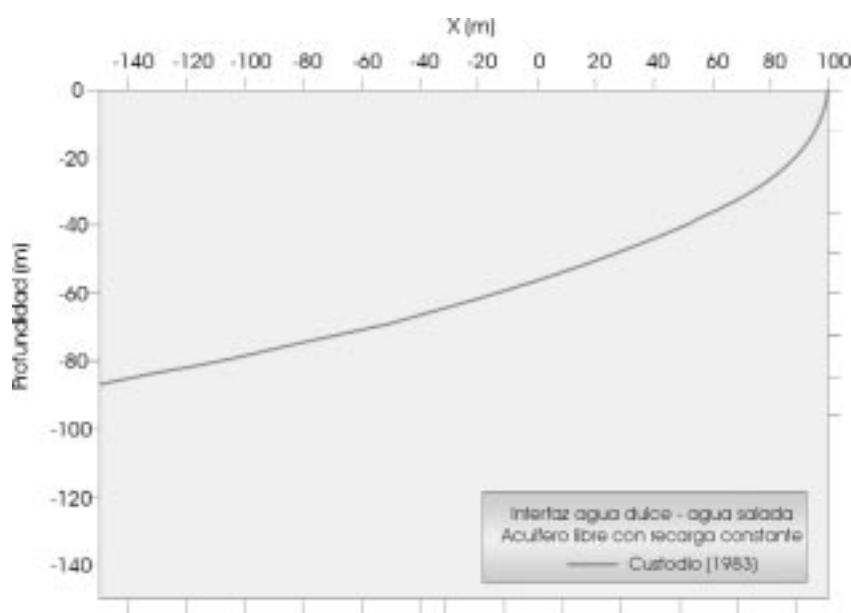


Fig. 8. Interfaz entre el agua dulce y el agua salina calculada por medio de la solución propuesta por Custodio, 1983. (Ecuación 6). En la vertical del túnel la interfaz se sitúa a 56,4 m de profundidad

Fig. 8. Interface between fresh and saline waters computed from Custodio's solution (Custodio, 1983) according to Equation 6. At the tunnel vertical the interface is located at a depth of 56,4 m

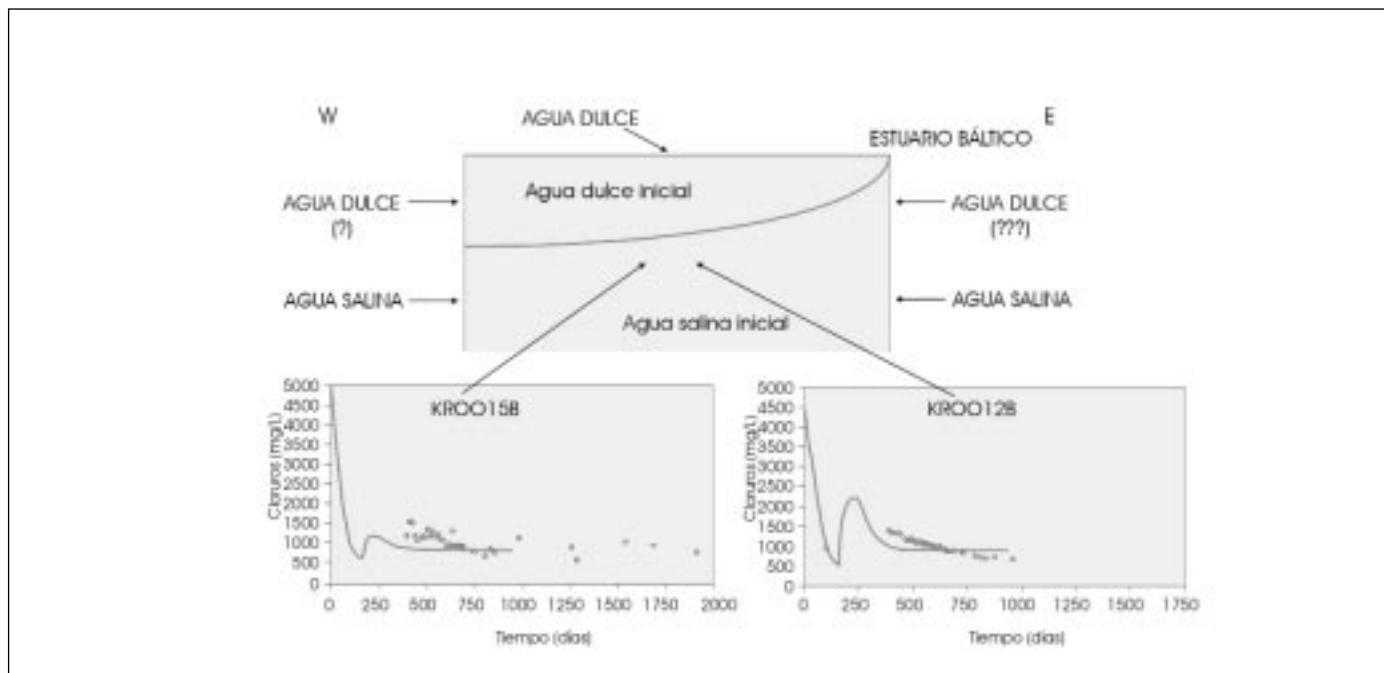


Fig. 9. Valores calculados y medidos de las concentraciones de cloruros a 70 m de profundidad. Se muestran los resultados correspondientes al mejor ajuste alcanzado con el primer modelo numérico

Fig. 9. Computed and measured chloride concentrations at a depth of 70 m. This run provides the best results achieved with the first numerical model

figura se aprecia que la antigua isla de Bockholmen se encuentra actualmente conectada con Hälo. Esta conexión se produce por medio de un vertedero que está relacionado con la construcción de la central nuclear de Oskarshamn, que se encuentra situada en las proximidades de la zona de estudio. El vertedero tiene dos partes bien diferenciadas, una parte antigua sobre la que se ha desarrollado una cobertura vegetal, y una zona más moderna, actualmente en operación (Figura 10-B). Se ha constatado que la parte más moderna del vertedero está compuesta por bloques de granito y hormigón fundamentalmente, aunque también se detectó la existencia de arenas, arcillas y cemento. El vertedero está directamente en contacto con el afloramiento de la Zona Redox. De hecho, parte del afloramiento de la zona de fractura se encuentra en la actualidad cubierto por el vertedero (Figura 10-B). Por lo tanto, la zona de fractura no se encuentra en contacto con el estuario Báltico en su contorno oeste, sino que pasa por debajo del vertedero rocoso, el cual constituye precisamente en esta zona el punto de mayor elevación topográfica del entorno. Por otra parte, el contorno este de Bockholmen se encuentra en contacto con un estuario muy estrecho y somero. Inmediatamente después del estuario Báltico aparece una isla de dimensiones considerables (isla de Ävrö).

La Figura 11 muestra un esquema del modelo con-

ceptual revisado que se propone para el funcionamiento hidrogeológico, en condiciones naturales, del entorno de la Zona Redox. El dominio del modelo se ha extendido con el objetivo de alcanzar contornos naturales hidrogeológicos del sistema, que coinciden con divisorias de agua subterránea. Hacia el oeste, la zona central del vertedero constituye la máxima elevación topográfica. Hacia el este, más allá del estuario Báltico, el modelo se ha extendido hasta la divisoria de aguas existente en la isla de Ävrö. Este modelo conceptual contempla la existencia previsible de dos cuerpos lenticulares someros de agua dulce, uno debajo de la superficie de Bockholmen y otro debajo de la isla de Ävrö. En condiciones naturales, ambos sistemas hidrogeológicos someros presentan comportamientos independientes, puesto que se encuentran separados por el estuario Báltico que actúa como la zona de descarga natural de ambos sistemas. En esta situación, el agua subterránea somera fluye desde las respectivas zonas de recarga hacia la descarga en el estuario. Las interfaces entre el agua dulce y el agua salina alcanzan sus profundidades máximas debajo de las zonas de recarga, tendiendo a cero en las proximidades del Báltico. La Figura 12 muestra el modelo conceptual hidrogeológico en las condiciones alteradas, es decir, cuando el sistema es modificado en primer lugar por la presencia del túnel, y des-

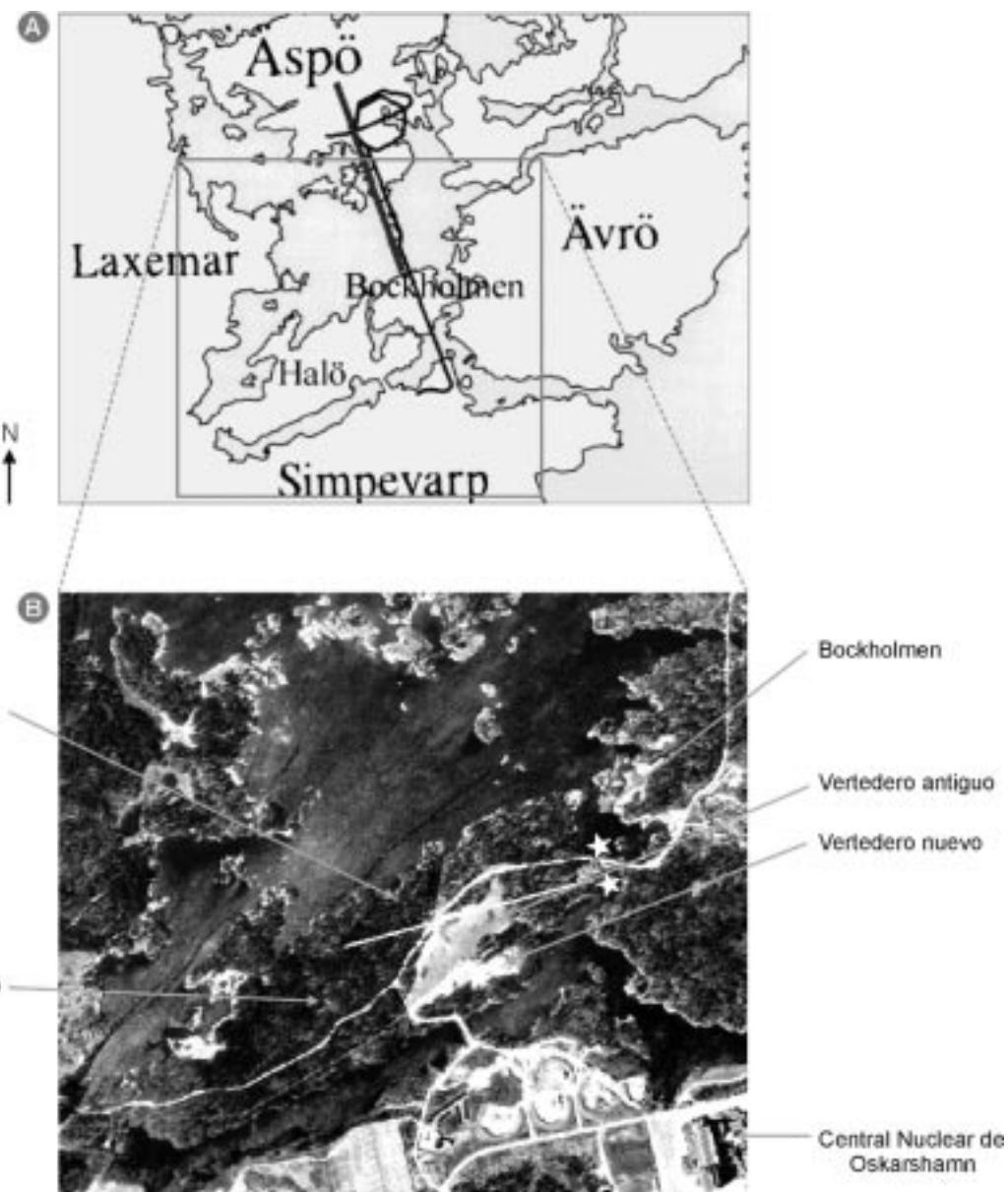


Fig. 10. A) Mapa de la zona de Åspö en el que se muestra la situación de las islas de Åspö, Ävrö y Bockholmen. Halö es una península conectada con la zona de Simpevarp. B) Fotografía aérea del entorno de la Zona Redox en la que se muestra la traza del afloramiento de la zona de fractura. La central nuclear de Oskarshamn se sitúa en la zona de Simpevarp. En frente de la central nuclear se observa que (la supuesta isla de) Bockholmen se encuentra conectada con Halö por medio de un gran vertedero de rocas y bloques provenientes de la central nuclear. La zona de fractura está cubierta por el vertedero y en contacto con el estuario Báltico que separa Bockholmen de Ävrö. Los símbolos de estrella representan los puntos donde se muestreó el agua báltica utilizada como condición de contorno en el modelo. (Foto aérea con autorización del Swedish Lanfméteaverket 1999. Extraída del GSD-Ekonomi map 507-99-236)

Fig. 10. A) Map of the Åspö area showing the location of Åspö, Ävrö and Bockholmen islands. Halö is a peninsula connected to the mainland at Simpevarp. B) Aerial view of the Redox Zone site showing the trace of the fracture zone outcrop. The Oskarsham Power Plant is located at Simpevarp. In front of the Power Plant, Bockholmen appears connected with Halö by means of a big rock landfill. The fracture zone goes under the landfill and it is in contact with the Baltic estuary, which separates Bockholmen and Ävrö island. Star symbols represent the location of water samples used to characterize the chemical composition of the estuary. (Aerial picture with the authorisation from Swedish Lanfméteaverket 1999. From GSD-Ekonomi map 507-99-236)

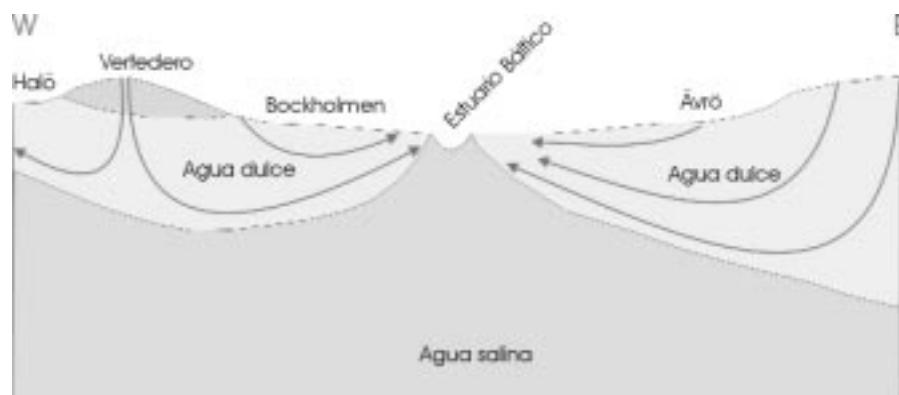


Fig. 11. Modelo conceptual revisado para el funcionamiento hidrogeológico, en condiciones naturales, de la Zona Redox
Fig. 11. Revised hydrogeological conceptual model of the Redox Zone under undisturbed natural conditions

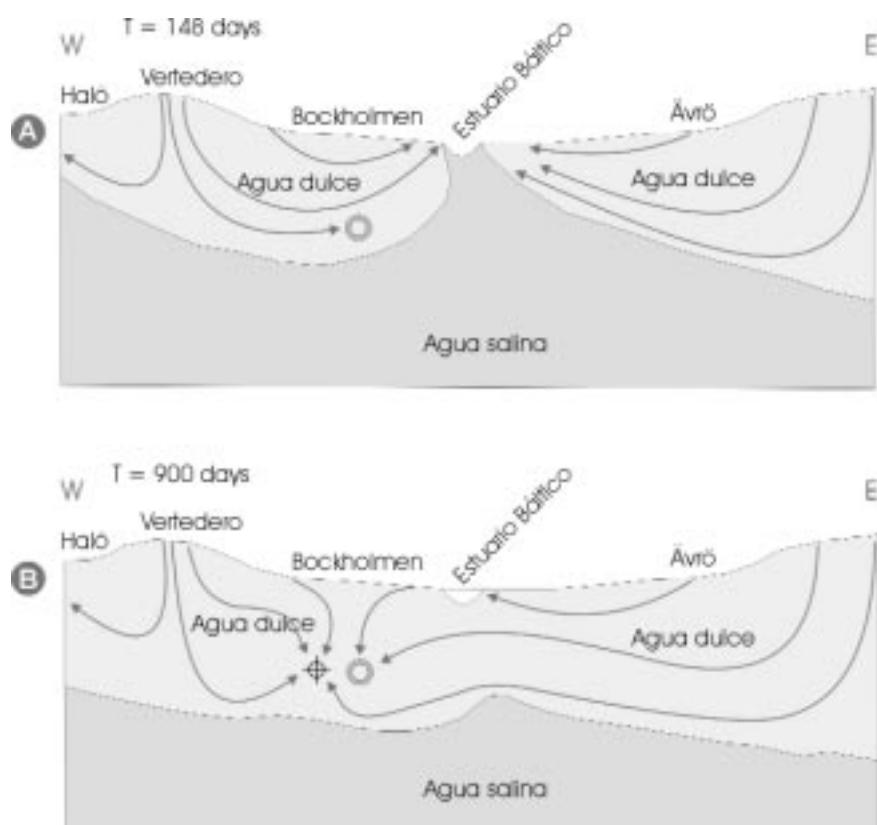


Fig. 12. Modelo conceptual revisado para el funcionamiento hidrogeológico, en condiciones alteradas, de la Zona Redox. A) Justo antes de la apertura del sondeo de drenaje. B) Al final del experimento
Fig. 12. Revised hydrogeological conceptual model of the Redox Zone under disturbed conditions: A) Just prior to the opening borehole KR0013B; and B) At the end of the experiment

pués por la apertura del sondeo de drenaje (sondeo KR0013B). Durante los primeros 148 días el túnel es el único sumidero de agua subterránea, con un caudal de descarga de 0,9 L/min. Algunas de las líneas de flujo que en condiciones naturales descargaban en el Báltico son interceptadas por el túnel (Figura 12-A). El sondeo de drenaje fue abierto tras 149 días de experimento, midiéndose una descarga de agua estabilizada de 7,6 L/min. El modelo conceptual que se propone postula que, cierto tiempo después de la apertura del sondeo, la perturbación hidráulica producida por el mismo alcanza la zona del estuario Báltico, captando parte del agua dulce somera del sistema hidrogeológico de la isla de Ävrö (Figura 12-B). La propagación de los descensos piezométricos hacia el este es responsable del lavado del agua salina situada inicialmente debajo del estuario Báltico. El agua dulce proveniente tanto del oeste (vertedero en Bockholmen) como del este (isla de Ävrö) explica la dilución observada en el entorno del túnel durante el experimento. Cabe resaltar que el modelo conceptual revisado es coherente con la existencia de un flujo de agua dulce proveniente de la zona donde se encuentra el estuario Báltico.

Modelo numérico revisado

Descripción del modelo

El segundo modelo numérico del Experimento de la Zona Redox, tomado se basa en el modelo conceptual revisado descrito en el apartado anterior (Figuras 11 y 12). El dominio del modelo numérico se extiende lateralmente hasta alcanzar las divisorias de aguas subterráneas, lo que permite soslayar hipótesis innecesarias y poco realistas sobre los "flujos laterales". El dominio del modelo se extiende también en profundidad, con el objetivo de minimizar los efectos de las incertidumbres existentes sobre la condición de contorno en profundidad. La traza superficial del perfil modelizado se muestra en la Figura 13, en la que se localiza el perfil dentro de una vista tridimensional de la topografía de la zona de estudio. El dominio tiene unas dimensiones próximas a 1 km de longitud y se extiende desde la isla de Ävrö en el este hasta Bockholmen en el oeste. El estuario Báltico queda centrado en el perfil del modelo (Figura 13).

La malla de elementos finitos utilizada para la discretización espacial contiene 1.049 nudos y 1.985 elementos triangulares (Figura 14). La malla ha se refina en el entorno del túnel y los sondeos, así como en las

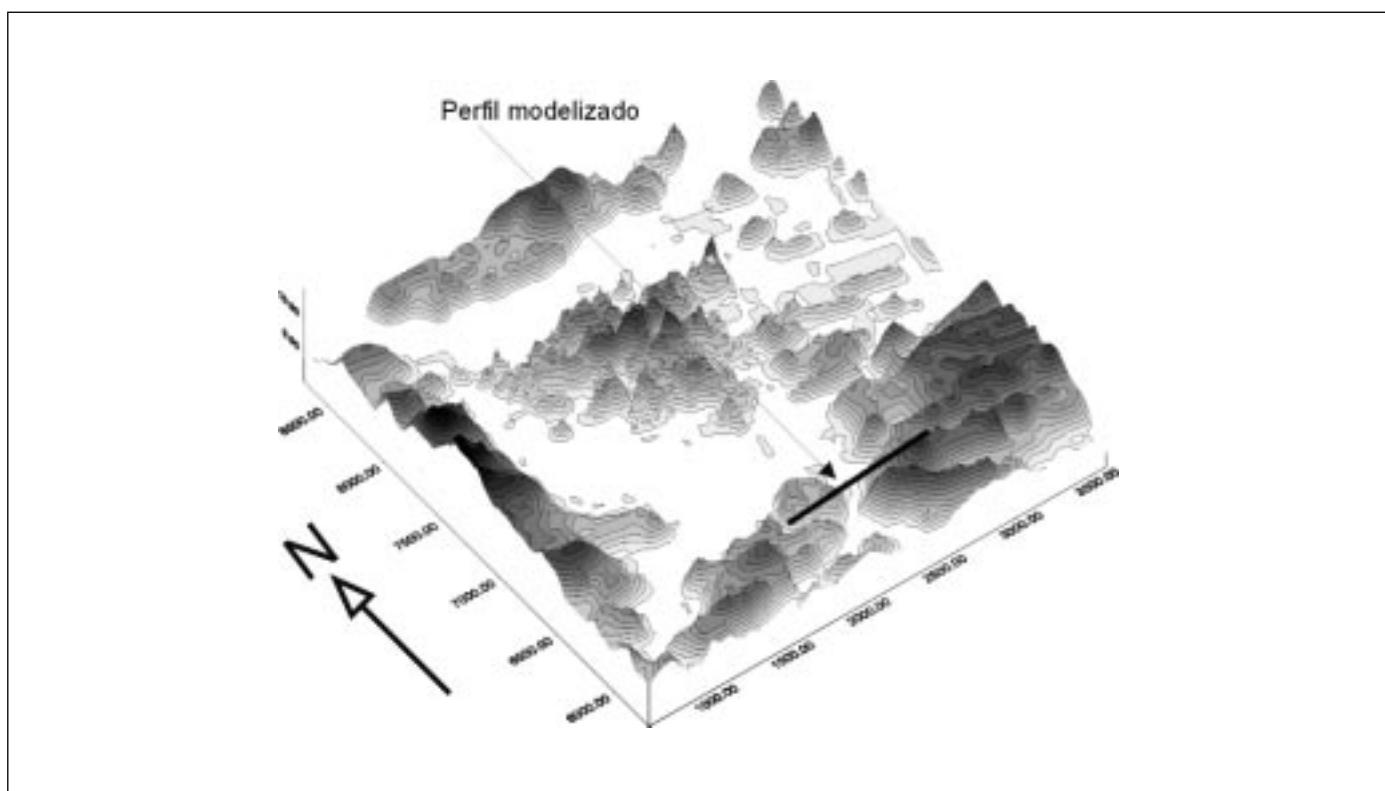


Fig. 13. Vista tridimensional de la superficie topográfica de la zona de Äspö, con la traza del perfil modelizado
Fig. 13. Three-dimensional topographic surface of the Äspö site showing the trace of the extended model domain

proximidades del estuario Báltico, donde se esperan los mayores gradientes de niveles y concentraciones. El tamaño de los elementos aumenta de forma progresiva hacia el contorno lateral del este y el contorno inferior, puesto que en dichas zonas no se requiere gran precisión numérica.

Para incluir la heterogeneidad natural de la zona de fractura se considera una zonación del dominio del modelo (Figura 14). Cada zona del modelo consta de un grupo de elementos que comparten los mismos valores de los parámetros hidrodinámicos y de transporte de solutos. Se consideran tres zonas de material para representar el granito: Zona 1 que se extiende desde la superficie hasta los 50 m de profundidad; Zona 2 que cubre desde 50 hasta 150 m de profundidad y; Zona 3 que se extiende desde 150 m de profundidad hasta la base del dominio a 300 m bajo el nivel del mar (Figura 14). Por último se definen las zonas 4 y 5 para representar los sedimentos arcillosos del fondo del estuario Báltico y el material de relleno del vertedero, respectivamente (Figura 14).

Los contornos laterales coinciden con divisorias de aguas subterránea y, por lo tanto, se asocian a condiciones de contorno de límite impermeable. En el contorno superior se impone una recarga de agua de 30 mm/año, excepto en la posición del estuario Báltico donde el nivel piezométrico se fija a un valor constante igual a 0 m. En el contorno inferior, se impone un valor de nivel piezométrico igual a un valor suficientemente alto para evitar que el agua dulce recargada en la superficie pueda alcanzar dicho contorno, es decir, se supone que no existe flujo

desde la superficie freática hacia el contorno inferior situado a una profundidad de 300 m. Esta hipótesis es coherente con la información hidroquímica disponible en el laboratorio de Äspö para condiciones inalteradas. Según Laaksoharju y Wallin (1997) las aguas subterráneas muestreadas con anterioridad a la construcción del túnel, a una profundidad de 300 m, tienen unas concentraciones de cloruros del orden de 8.000 mg/L. De igual forma que en el primer modelo numérico, los caudales drenados en el túnel y en el sondeo KR0013B se tratan con una condición de contorno interna del modelo, imponiendo los valores de los caudales de drenaje medidos durante el experimento.

Para las condiciones de contorno de transporte de solutos, en el contorno inferior se fijan las concentraciones del agua salina nativa, y las del agua dulce de recarga en el contorno superior, excepto en la posición del estuario donde se utilizan las composiciones químicas determinadas en el agua Báltica. La mayor incertidumbre relacionada con estas condiciones de contorno está en el contorno inferior, puesto que sólo se cuenta con la información hidroquímica de la Zona Redox en condiciones naturales para una profundidad de 70 m. Sin embargo, en el Laboratorio Subterráneo de Äspö se cuenta con una amplia base de datos hidroquímicos correspondientes a otras zonas de fractura presentes en la isla. Por lo tanto, se utilizó esta información para estimar las concentraciones químicas a una profundidad de 300 m en la Zona Redox (Molinero 2000). Las concentraciones químicas del agua salina profunda, el agua de recar-

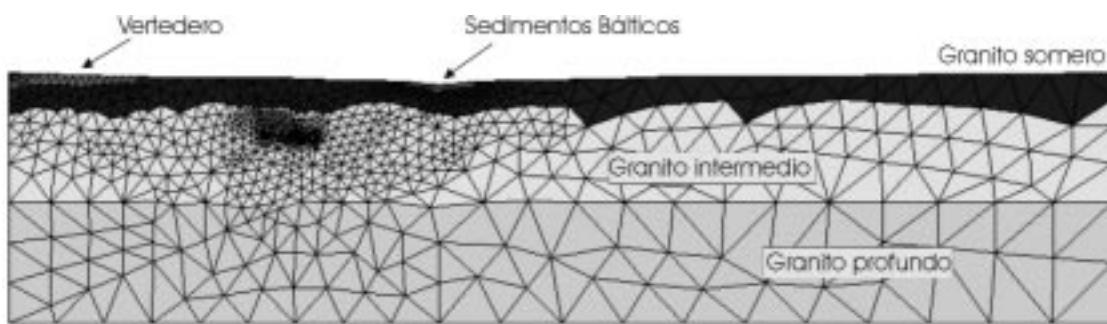


Fig. 14. Malla de elementos finitos utilizada para la discretización espacial del segundo modelo numérico. La malla se refina en el entorno del túnel y cerca del Estuario Báltico. Se presenta también la zonación de materiales utilizada para representar la heterogeneidad del medio

Fig. 14. *Finite element mesh used for the revised numerical model of the Redox Zone. The mesh is refined near the tunnel, boreholes and Baltic estuary. Zonation accounts for spatial heterogeneity*

ga y el agua del estuario Báltico consideradas en el modelo se muestran en la Tabla 2.

Los niveles piezométricos en condiciones naturales se suponen estacionarios y se obtienen resolviendo el problema estacionario sin la presencia del túnel y el sondeo de drenaje (Figura 15-A). En dicha figura es posible apreciar que no existe ninguna línea de flujo proveniente del nivel freático que cruce el contorno inferior del modelo. Sin embargo, el mapa de las isopezas calculadas indica que en condiciones naturales existe un flujo desde el contorno inferior hacia la zona de descarga del estuario Báltico. Estas líneas de flujo son coherentes con la existencia de flujos regionales desde la zona de Laxemar y Ävrö, tal y como se describe en el modelo regional de flujo de la zona de Äspö (Svensson, 1997). Por otra parte, el nivel freático calculado en condiciones naturales se encuentra siempre por debajo de la superficie del terreno. En la vertical del túnel, la posición calculada

Componente químico	Agua dulce de recarga (Mol/L)	Agua del estuario Báltico (Mol/L)	Agua salina del contorno profundo (Mol/L)
Cl ⁻	1.69 x 10 ⁻⁴	1.00 x 10 ⁻¹	2.25 x 10 ⁻¹
Ca ²⁺	9.58 x 10 ⁻⁴	2.43 x 10 ⁻³	4.96 x 10 ⁻²
Mg ²⁺	1.64 x 10 ⁻⁴	5.43 x 10 ⁻³	8.10 x 10 ⁻³
Na ⁺	6.69 x 10 ⁻⁴	8.52 x 10 ⁻²	1.09 x 10 ⁻¹
Sr ²⁺	2.51 x 10 ⁻⁶	2.45 x 10 ⁻⁴	2.45 x 10 ⁻⁴
Li ⁺	1.44 x 10 ⁻⁶	4.61 x 10 ⁻⁵	8.00 x 10 ⁻⁵
Fe ²⁺	1.00 x 10 ⁻⁵	1.13 x 10 ⁻⁵	1.13 x 10 ⁻⁵
K ⁺	6.65 x 10 ⁻⁵	2.33 x 10 ⁻⁴	4.50 x 10 ⁻⁴
SiO ₂	9.98 x 10 ⁻⁵	9.32 x 10 ⁻⁵	9.32 x 10 ⁻⁵
HCO ₃ ⁻	2.24 x 10 ⁻³	1.47 x 10 ⁻³	1.05 x 10 ⁻³
SO ₄ ²⁻	2.50 x 10 ⁻⁴	3.38 x 10 ⁻³	4.95 x 10 ⁻³

Tabla 2. Composiciones químicas de las aguas de los contornos utilizadas en el segundo modelo numérico del Experimento de la Zona Redox

Table 2. Chemical composition of boundary waters used in the revised numerical model of the Redox Zone Experiment

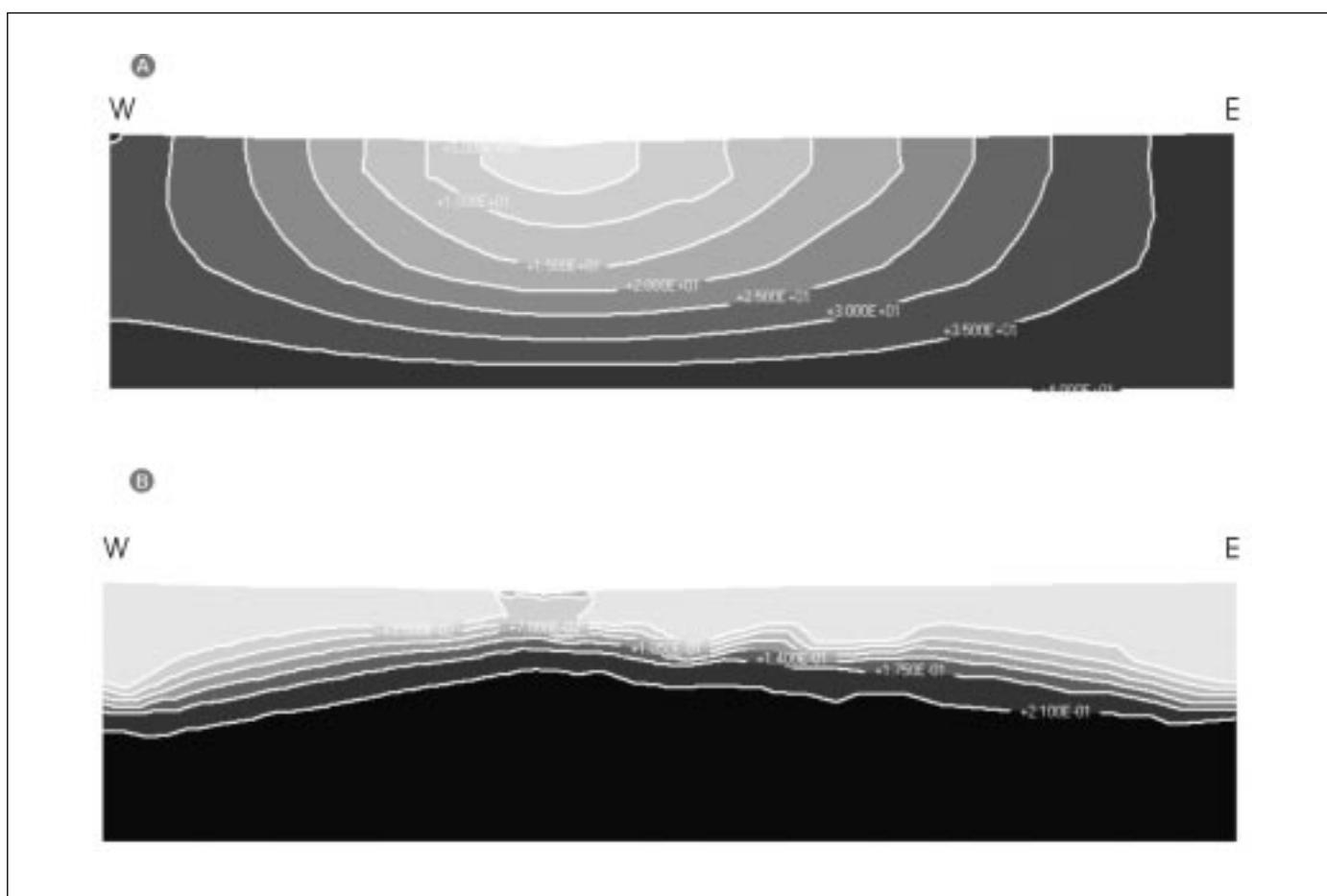


Fig. 15. Estado estacionario calculado para el sistema en condiciones naturales. A) Niveles piezométricos. B) Concentraciones de cloruros. Estos resultados se utilizan como condiciones iniciales para la simulación del Experimento de la Zona Redox

Fig. 15. Computed steady-state values under natural conditions for A) hydraulic heads (results are in dm) and B) chloride concentrations (mol/L). These results are used as initial conditions for the transient simulation of the Redox Zone Experiment

del nivel freático es de 1,05 m.s.n.m. Este valor corresponde prácticamente con el citado por Banwart *et al.* (1999) para las condiciones inmediatamente anteriores a la construcción del túnel.

Las incertidumbres sobre las condiciones iniciales de la química del agua subterránea son mayores que las existentes para los niveles piezométricos. La información disponible antes de construir el túnel indica la existencia de una interfaz entre el agua dulce y el agua salina localizada entre 45 y 70 m de profundidad. Para el modelo numérico, la distribución de salinidades en condiciones inalteradas debe ser coherente con el régimen hidrogeológico estacionario que, previsiblemente, ha prevalecido más o menos inalterado durante los últimos miles de años. Según Laaksoharju y Wallin (1997), la configuración geográfica de Äspö ha permanecido estable durante los últimos 2.000 años. Con anterioridad a dicha fecha, la zona de Äspö estuvo completamente cubierta por el Mar Litorina (que corresponde a una fase anterior a la del actual Mar Báltico) durante un período de aproximadamente 6.000 años. Durante esta época pasada el agua salada se infiltró a través de las zonas de fractura. Por lo tanto, la distribución actual de salinidades en el subsuelo de las tierras emergidas debe ser el resultado de un proceso de lavado y desplazamiento continuo del agua salada por el agua dulce que ha estado fluyendo, al menos durante los últimos 2.000 años, desde las zonas de recarga hacia las descargas naturales que se producen en las proximidades de la línea de costa Báltica. A partir de estas consideraciones, se realizan simulaciones numéricas a largo plazo de las condiciones naturales del sistema hidrogeológico natural, con el objetivo de evaluar numérica-

mente la consistencia de las hipótesis apuntadas anteriormente. En estas simulaciones se parte de un modelo que contiene inicialmente agua salina en todo el dominio. Tras definir las condiciones de entorno de recarga de agua dulce en las partes emergidas del perfil se simula el comportamiento del sistema hasta alcanzar el estacionario de salinidad del agua al cabo de 4.000 días, que es coherente con las consideraciones paleogeográficas propuestas por Laaksoharju y Wallin (1997). La Figura 15-B muestra el mapa de isoconcentraciones de cloruro en el estado estacionario, calculado con el modelo numérico del sistema en condiciones inalteradas. En esta figura se puede observar que la distribución final de salinidad es coherente con la situación inicial prevista según el modelo conceptual propuesto para la Zona Redox (Figura 12).

Por lo tanto, el modelo numérico revisado para el Experimento de la Zona Redox abarca un horizonte temporal de 4.983 días. Los primeros 4.000 días se usan para alcanzar el estado estacionario inicial en condiciones inalteradas y, los 983 días restantes corresponden a la simulación del Experimento de la Zona Redox (condiciones alteradas por la presencia del túnel y el sondeo de drenaje). Con esta metodología de modelización, las condiciones iniciales para el modelo del Experimento de la Zona Redox son auto-generadas por el propio modelo numérico. Además, cualquier cambio en el modelo numérico afecta también a las propias condiciones iniciales, lo cual garantiza la coherencia entre las condiciones naturales y la situación alterada por la presencia del túnel.

Las estimaciones iniciales de los valores utilizados para los parámetros de flujo y transporte de solutos

Zona de material	Transmisividades (m ² /día)		Coeficientes de almacenamiento	Porosidad	Dispersividad longitudinal (m)	Dispersividad transversal (m)				
	C a l i b r a d o s									
	Estim. initial	Final								
Granito somero (profundidad: 0-40 m)	15	100	4×10^{-3}	0.01	30	15				
Granito intermedio (prof.: 40-80 m)	0.24	0.1	4×10^{-3}	0.01	30	15				
Granito profundo (prof.: 80-300 m)	0.024	0.05	4×10^{-3}	0.01	30	15				
Sedimentos del estuario Báltico	10^{-4}	10^{-4}	4×10^{-3}	0.1	30	15				
Vertedero rocoso	2	100	4×10^{-3}	0.01	30	15				

Tabla 3. Parámetros de flujo y transporte del segundo modelo numérico. Únicamente se calibran los valores de las transmisividades del granito. El resto de los parámetros corresponden a la estimación inicial

Table 3. Flow and solute transport parameters of the revised numerical model. Only transmissivities of granite were calibrated. Other parameters remained unchanged during calibration

fueron extraídas de Gustafsson *et al.* (1994) y se listan en la Tabla 3.

El modelo de transporte de solutos se realizó en modo multicomponente, es decir, se resolvió para todas las especies disueltas mayoritarias y algunas de las minoritarias. El modelo numérico contempla el transporte de: Cl^- , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , Sr^{2+} , Li^{2+} , Fe^{2+} , SiO_2 , K^+ , HCO_3^- y SO_4^{2-} . En el presente trabajo, todas las especies se consideran conservativas. Molinero (2000) y Molinero y Samper (2003a,b) tienen en cuenta el hecho de que algunas de estas especies están afectadas por procesos hidrogeoquímicos, como por ejemplo intercambio catiónico y disolución-precipitación de diversos minerales. Los modelos acoplados de flujo y transporte de solutos reactivos se pueden consultar en Molinero y Samper (2003a), Molinero *et al.* (2003 a) y Samper *et al.* (2003).

Calibración y resultados del modelo

Las condiciones de contorno y los parámetros del modelo numérico se asignan en función de la información disponible, generada tanto por el propio Experimento de la Zona Redox como por otros proyectos y experimentos realizados en el Laboratorio Subterráneo de Äspö. Para algunos parámetros esta información es escasa y, por lo tanto, incierta. Por lo tanto, los valores de dichos parámetros y condiciones fueron ajustados por medio de un proceso de calibración del modelo. La calibración se centró en los valores de las transmisividades de las tres zonas del granito fracturado, así como en las concentraciones de los solutos en el contorno inferior. La calibración se realizó por tanteos, comparando los resultados del modelo numérico con los datos medidos durante el experimento en la zona de fractura. Para la calibración se utilizó información sobre: 1) concentraciones de solutos en condiciones naturales medidas en la posición del túnel (70 m de profundidad); 2) evolución transitoria de los descensos en el sondeo HBH01; 3) curvas de dilución del Br^- , Cl^- , Mg^{2+} , Sr^{2+} , Li^{2+} en los sondeos KR0015B y KR0012B; y 4) evolución de las concentraciones de cloruro en los sondeos someros (HBH01 y HBH02). Los valores iniciales de los parámetros y los resultados de la calibración del modelo se muestran en la Tabla 3. La Figura 16 muestra la comparación de las concentraciones calculadas y medidas, a 70 m de profundidad, para el caso de condiciones inalteradas. Esta figura incluye las especies químicas más relevantes que se han considerado en el modelo numérico. Se puede observar que, en general, el modelo numérico reproduce adecuadamente todas las especies químicas disueltas con las

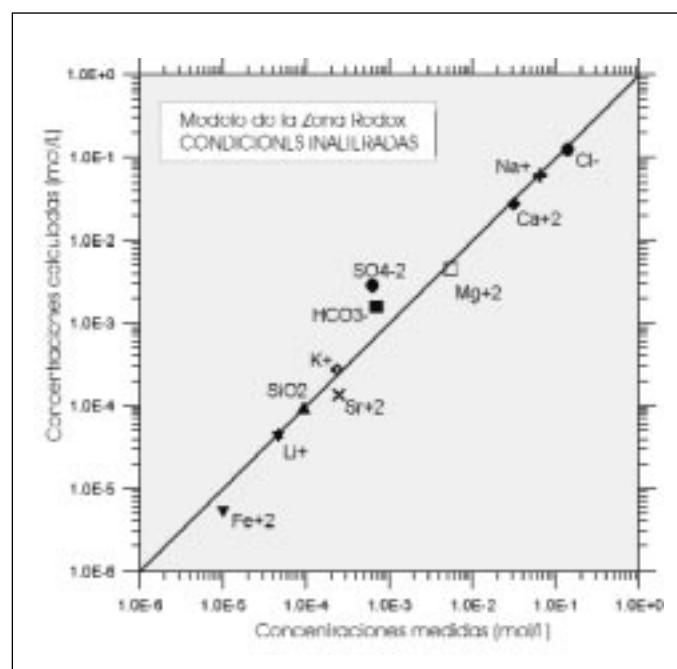


Fig. 16. Comparación de las concentraciones calculadas y medidas a 70 m de profundidad en condiciones naturales

Fig. 16. Comparsion of computed and measured concentrations at the tunnel (70 m depth) for natural conditions

excepciones de los bicarbonatos, los sulfatos y el hierro, que están afectadas por procesos hidrogeoquímicos y microbiológicos (Banwart *et al.*, 1999; Molinero, 2000; Samper *et al.*, 2003).

La calibración del modelo requirió incrementar los valores de transmisividad de las zonas somera y profunda del granito fracturado, mientras que la zona intermedia requirió una disminución de transmisividad de 0,24 a 0,1 $\text{m}^2/\text{día}$. A pesar de estos ajustes, los valores calibrados de las transmisividades decrecen con la profundidad (Tabla 3), lo cual es coherente con la reducción de espesor en profundidad observado en la zona de fractura.

Los niveles piezométricos y las concentraciones calculadas para las condiciones inalteradas del sistema (Figura 15) constituyen las condiciones iniciales del modelo numérico para la simulación del Experimento de la Zona Redox.

La Figura 17 muestra los mapas de isopiezas correspondientes a: a) 145 días, cuando el túnel es aún el único sumidero de agua subterránea en el sistema; b) 163 días, poco después de abrir el sondeo de drenaje; y c) 906 días, fecha próxima al final del experimento. Estos mapas de isopiezas ilustran claramente la propagación de la perturbación hidráulica inducida por la construcción del túnel y por la acción del sondeo de drenaje. Se puede observar además cómo

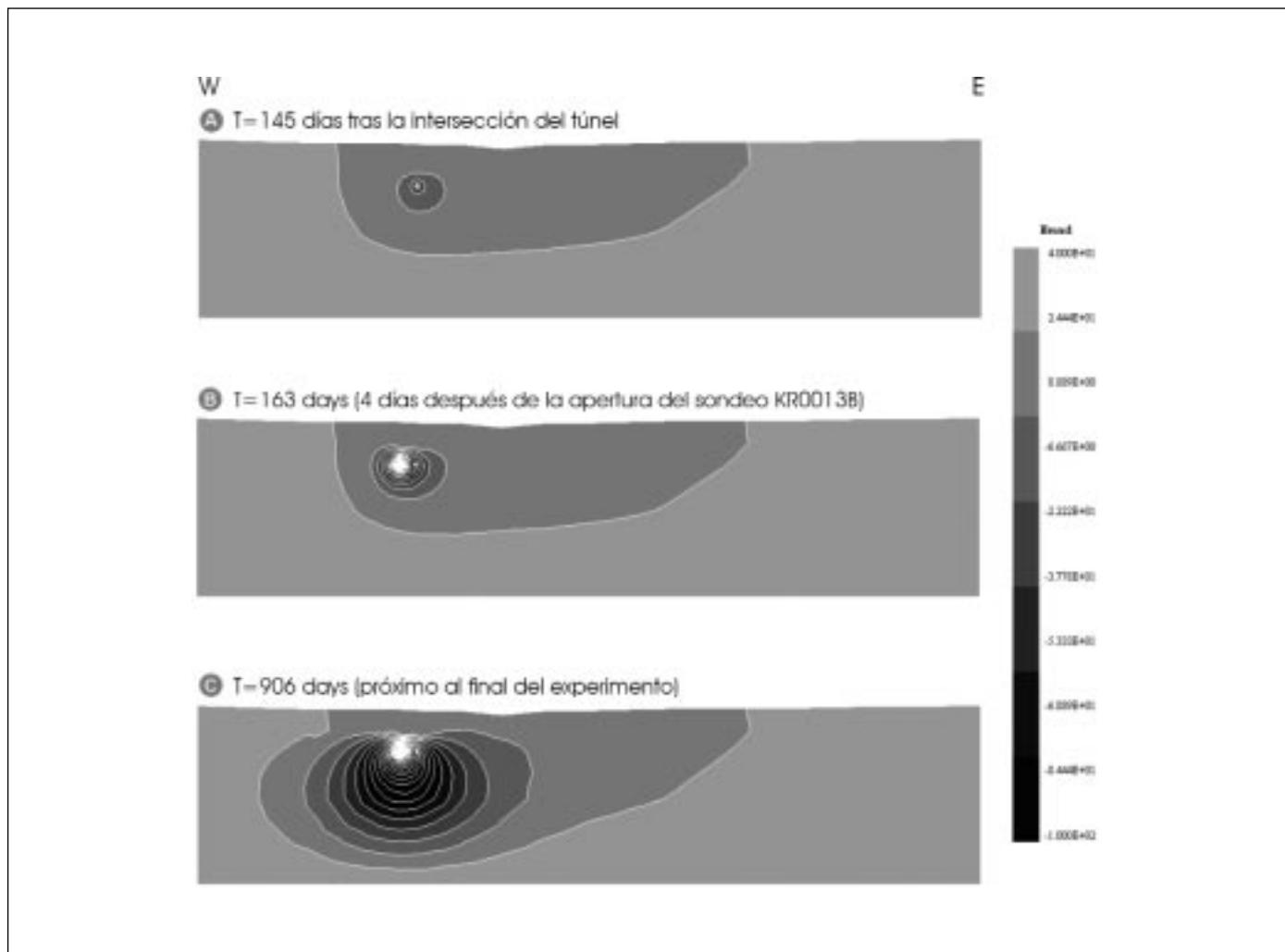


Fig. 17. Mapas de isopiezas calculadas (en dm) para A) día 145 tras la intersección del túnel; B) día 163, poco después de abrir el sondeo de drenaje y; C) día 906, prácticamente en el final del experimento

Fig. 17. Contour plots of computed hydraulic heads (dm) at: A) 145 days after tunnel intersection; B) 163 days (just after opening of bore-hole KR0013B); and C) 906 days (at the end of the experiment)

la perturbación hidráulica alcanza la posición del estuario Báltico. La evolución calculada de los niveles piezométricos reproduce satisfactoriamente los datos de niveles del sondeo HBH01 a 45 m de profundidad (Figura 18). Este sondeo es el único punto de observación en el que se registraron los niveles del agua subterránea durante el experimento.

En la Figura 19 se muestran los mapas de isoconcentraciones calculadas para los cloruros disueltos. Esta figura muestra las distribuciones para los días 0, 254 y 906. Se observa que la construcción del túnel y el sondeo de drenaje, provoca un aumento importante del flujo de agua dulce somera proveniente de Laxemar (oeste) y Ävrö (este). La llegada del agua dulce produce una notable dilución del agua en el entorno del túnel y, por lo tanto, una disminución de

las concentraciones de cloruros disueltos.

La Figura 20 muestra la comparación de las diluciones de cloruros calculadas y medidas en varios puntos de observación del experimento. A 15 m de profundidad (sondeo HBH02, Figura 20-A) no se observó ningún cambio en las concentraciones durante el experimento. A esta profundidad, la química del agua subterránea está controlada por el agua dulce de recarga tanto antes como durante el experimento. Por el contrario, a 45 m de profundidad (sondeo HBH01, Figura 20-B) se observa un aumento importante en las concentraciones de cloruros tras 250 días de experimento. No se cuenta con información sobre las condiciones iniciales hidroquímicas en este punto. El modelo numérico reproduce el comportamiento a esta profundidad con un cierto error

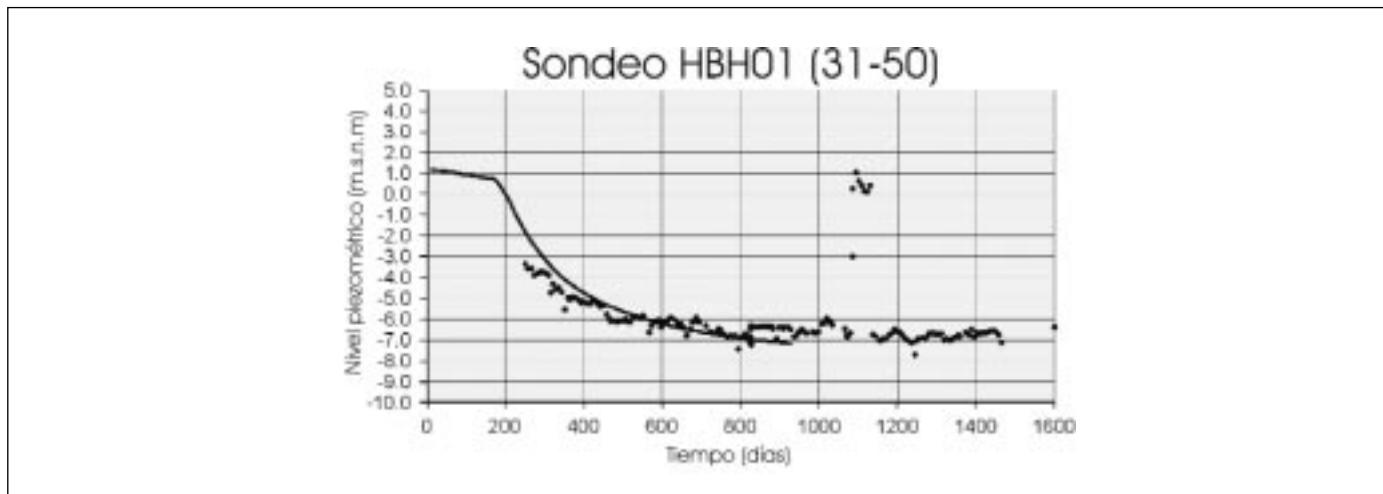


Fig. 18. Niveles piezométricos calculados (línea) y medidos (símbolos) en el sondeo HBH01. El tramo obturado del sondeo, en el que se realizaron las medidas, corresponde a una profundidad entre 31 y 50 m de profundidad

Fig. 18. Computed (line) and measured (symbols) hydraulic heads (m) at borehole HBH01 (45 m depth). Measured data correspond to a section packed-off from 31 to 50 m depth

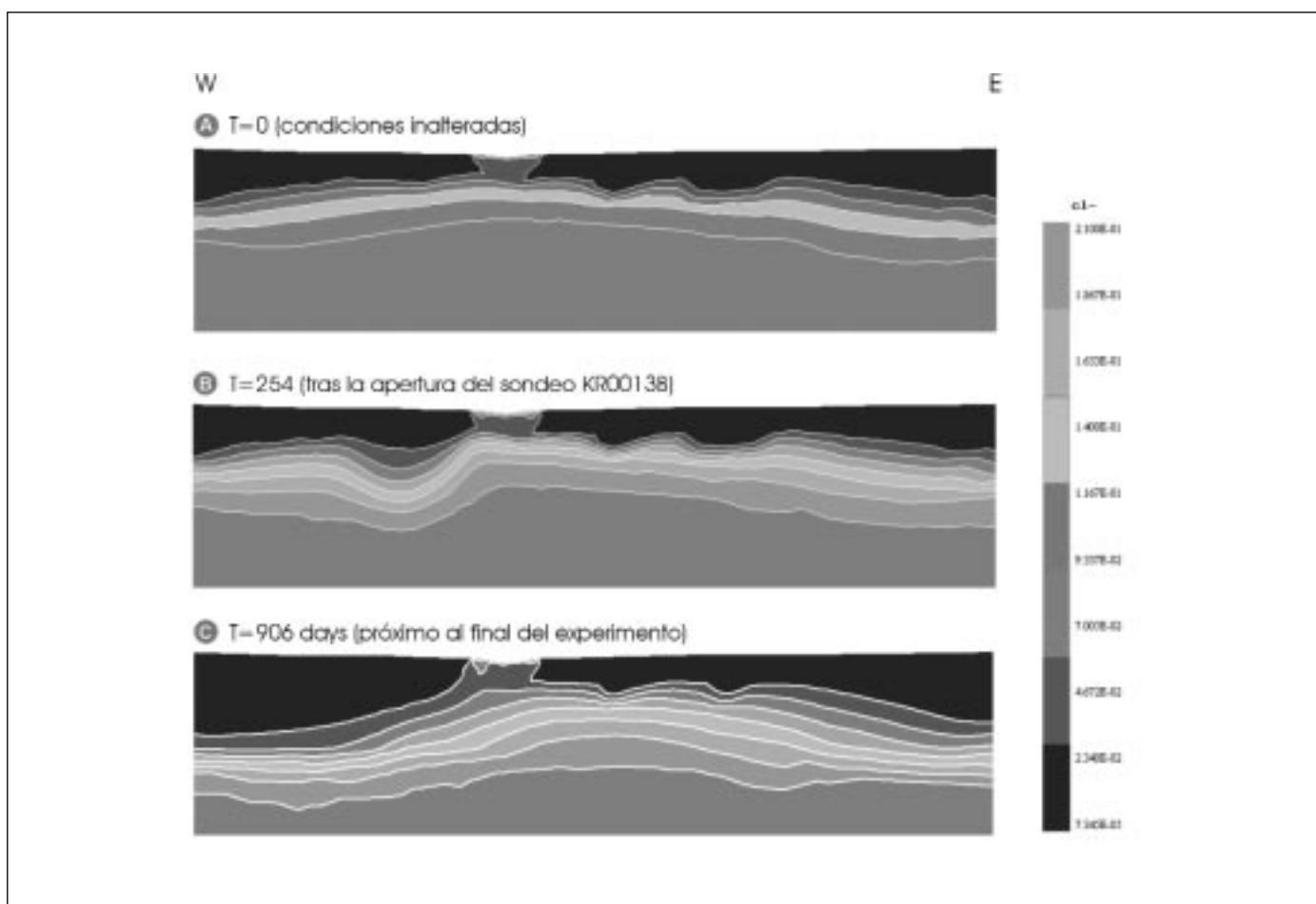


Fig. 19. Mapas de isoconcentraciones calculadas de cloruro para: A) tiempo inicial (sistema inalterado); B) día 254, justo después de la apertura del sondeo de drenaje y; C) día 906, prácticamente al final de experimento

Fig. 19. Contour plots of computed chloride concentrations (mol/L) at: A) undisturbed conditions; B) 254 days after tunnel intersection; and C) 906 days (at the end of the experiment)

inicial, aunque a partir de los 400 días los resultados numéricos tienden a coincidir con las medidas. El aumento de salinidad calculado a 45 m de profundidad es debido a la llegada del agua salina inicialmente debajo del estuario Báltico que, tras la llegada de la perturbación hidráulica a dicha posición, es lavada hacia el túnel por el agua dulce somera del sistema de Ävrö. La Figura 20 muestra también los resultados del modelo a una profundidad de 70 m, es decir, en el entorno del túnel. Se puede observar que los resultados numéricos reproducen muy bien las medidas de campo en estos puntos de observación más profundos, tanto en condiciones naturales como durante el experimento. Los resultados del modelo reproducen perfectamente la dilución medida en el sondeo KR0015B (Figura 20-D), aunque se observan algunas discrepancias entre los valores calculados y medidos en el sondeo KR0012B (Figura 20-C). Los sondeos

KR0015B y KR0012B se encuentran ambos a 10 m del sondeo de drenaje (KR0013B), uno a cada lado. Por lo tanto, entre ambos sondeos de observación existe una separación de 20 m (véase figuras 2 y 3). Los datos medidos muestran una dilución inicial algo mayor en el sondeo KR0012B, mientras que el modelo numérico predice prácticamente los mismos resultados en ambos puntos. Cabe recordar que, en base a los ensayos de trazadores realizados en la zona de fractura, el valor de dispersividad adoptado en el modelo es de 30 m, es decir, mayor que la separación entre los dos puntos de observación. Este hecho explica que los datos calculados con el modelo numérico en ambos puntos sean muy similares. La mayor dilución inicial registrada en el sondeo KR0012B puede ser debida al efecto de heterogeneidades locales, o de menor escala, que no son consideradas en el modelo. Aparte de las variaciones en el espesor, las

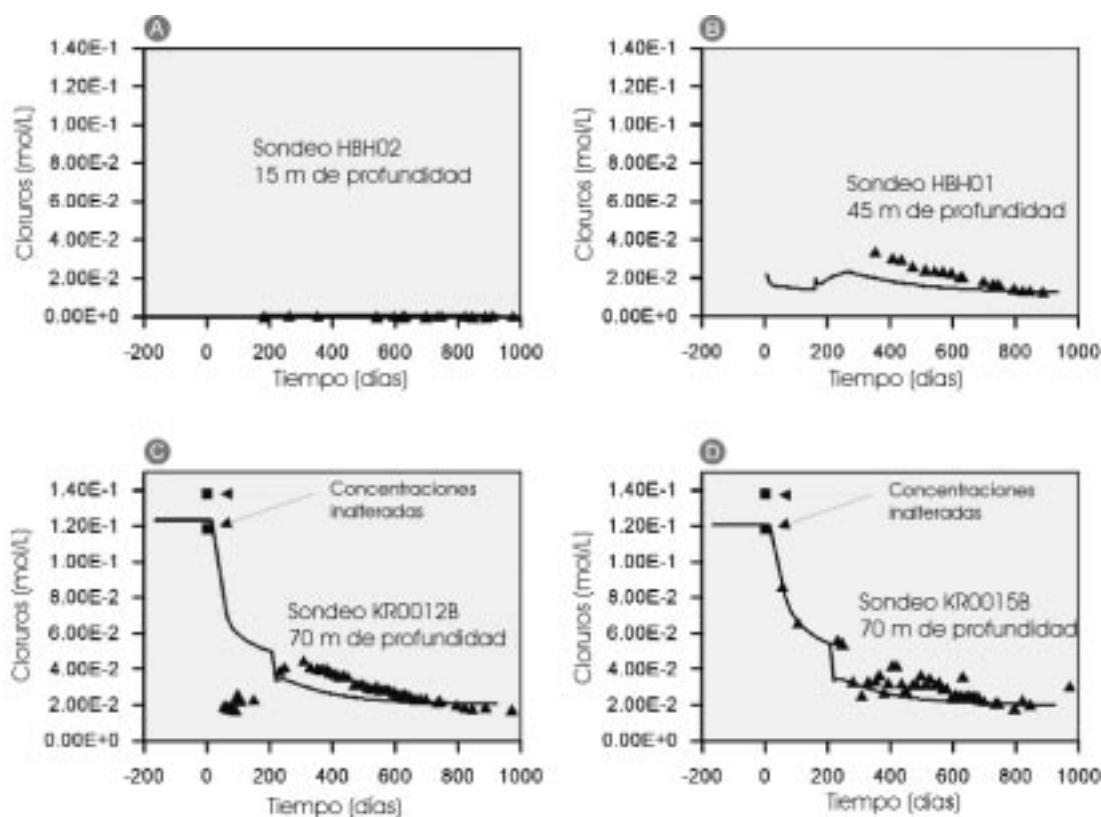


Fig. 20. Valores medidos (símbolos) y calculados (líneas) de las concentraciones de cloruros en los puntos de control. A) sondeo HBH02 a 15 m de profundidad; B) sondeo HBH01 a 45 m de profundidad; C) sondeo KR0012B a 70 m de profundidad y; D) sondeo KR0015B a 70 m de profundidad. El origen de tiempos corresponde al momento en el que el túnel interseca la zona de fractura

Fig. 20. *Measured (symbols) and computed (lines) chloride concentrations at control points: A) HBH02 (15 m depth); B) HBH01 (45 m depth); C) KR0012B (70 m depth); and D) KR0015B (70 m depth). T=0 when tunnel intersected the fracture zone*

conductividades hidráulicas medidas en diversas zonas de fracturas de Åspö pueden variar hasta 2 órdenes de magnitud de unos puntos a otros de la misma zona de fractura (Rhén *et al.*, 1997). La existencia de la heterogeneidad local es evidente en la Zona Redox y se revela en el hecho de las diferencias observadas en los caudales drenados por el túnel (0,9 L/min) y el sondeo abierto (7,6 L/min), que se encuentran separados por una distancia de 20 m. El modelo numérico cubre una extensión kilométrica y tiene en cuenta la heterogeneidad a gran escala, asociada fundamentalmente a los cambios de espesor de la zona de fractura en función de la profundidad. Sin embargo, el modelo no tienen en cuenta el efecto de las heterogeneidades a pequeña escala. Una representación adecuada de las heterogeneidades menores requeriría una mayor caracterización de los parámetros hidráulicos, que en este caso no fue realizada. El

modelo numérico que se presenta en este trabajo pretende reproducir el comportamiento hidrogeológico a gran escala y, por lo tanto, su capacidad para representar las variaciones del comportamiento hidrogeológico a pequeña escala es limitada.

El modelo numérico reproduce también las evoluciones medidas de las concentraciones del resto de las especies químicas conservativas o quasi-conservativas (Figura 21). Esta figura muestra también las concentraciones medidas y calculadas en las condiciones inalteradas. Se puede observar la coherencia entre las medidas de campo y las condiciones iniciales generadas con el modelo numérico.

De forma similar a lo que se observó para las condiciones inalteradas (Figura 16), las mayores discrepancias entre los valores medidos y los resultados calculados corresponden a los sulfatos, bicarbonatos, hierro y sodio (Figura 22). La simulación del compor-

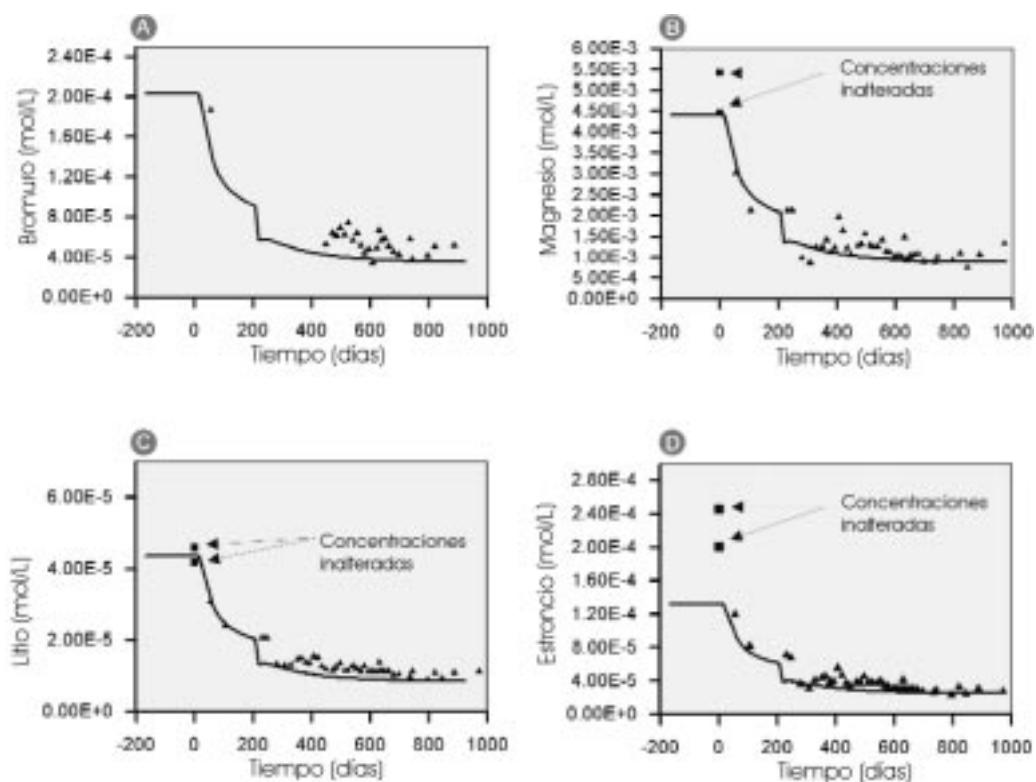


Fig. 21. Valores medidos (símbolos) y calculados (líneas) de las concentraciones de A) bromuro; B) magnesio; C) litio y; D) estroncio en el sondeo KR0015B (70 m de profundidad)

Fig. 21. Measured (symbols) and computed (lines) concentrations of: A) Bromide, B) Magnesium; C) Lithium; and D) Strontium at bore-hole KR0015B (70 m depth)

tamiento de dichas especies requeriría tener en cuenta el papel de los procesos químicos más relevantes que afectan a dichos componentes y que, en el presente trabajo, no se han considerado. Se han propuesto diversas hipótesis para explicar el origen de las distintas facies hidroquímicas existente en Äspö, así como para los procesos hidrogeoquímicos asociados a las mismas (Banwart *et al.*, 1995; 1996; 1999; Laaksoharju *et al.*, 1999 y Banwart, 1999). Estas hipótesis han sido evaluadas cuantitativamente por medio de modelos numéricos acoplados de flujo de agua y transporte de solutos reactivos (Molinero, 2000; Molinero *et al.*, 2000; Molinero *et al.*, 2003a; Samper *et al.*, 2003). Cabe mencionar que dichos modelos acoplados se basan directamente en los modelos conceptuales y numéricos presentados en el presente trabajo. El modelo conceptual y numérico del Experimento de la Zona Redox que se presenta en este trabajo proporciona el marco hidrogeológico necesario para el posterior desarrollo de los modelos acoplados de flujo, transporte reactivo y procesos microbiológicos que suceden en dicha zona de fractura.

Conclusiones

Se han presentado diversos modelos para el flujo de agua subterránea y el transporte de solutos en el Experimento de la Zona Redox de Äspö. Estos modelos son herramientas útiles para evaluar los efectos producidos por la construcción de un túnel sobre las condiciones hidrogeológicas e hidroquímicas de la

dicha zona de fractura. En primer lugar se ha presentado el modelo en elementos finitos basado en el modelo conceptual utilizado por Banwart *et al.* (1994 y 1999) para la interpretación hidroquímica del experimento. Dicho modelo conceptual presenta inconsistencias y limitaciones hidrogeológicas considerables. A pesar de que es posible construir un modelo numérico capaz de reproducir los descensos de nivel medidos durante el experimento, este modelo no puede reproducir el descenso de salinidad detectado en el entorno del túnel. Las limitaciones detectadas en este modelo se solucionan mediante una revisión en profundidad del modelo conceptual hidrogeológico. Como fruto de esta revisión se ha propuesto un nuevo modelo conceptual para explicar el comportamiento hidrogeológico de la zona de fractura, tanto antes de la construcción del túnel como durante el experimento. El nuevo modelo conceptual integra la información disponible en el laboratorio de Äspö sobre parámetros hidrodinámicos y de transporte de solutos, así como información hidroquímica de la Zona Redox y de otras zonas de fractura cercanas. Además, el nuevo modelo conceptual incluye nuevas condiciones de contorno hidrogeológicas que reducen considerablemente las incertidumbres del modelo anterior. Los resultados del modelo numérico basado en el modelo conceptual revisado son coherentes con los datos hidrogeológicos e hidroquímicos recogidos antes de la construcción del túnel. Además, es capaz de reproducir simultáneamente los descensos de los niveles del agua subterránea y las diluciones de salinidad inducidas por la construcción del túnel.

Un resultado importante del presente trabajo radia-

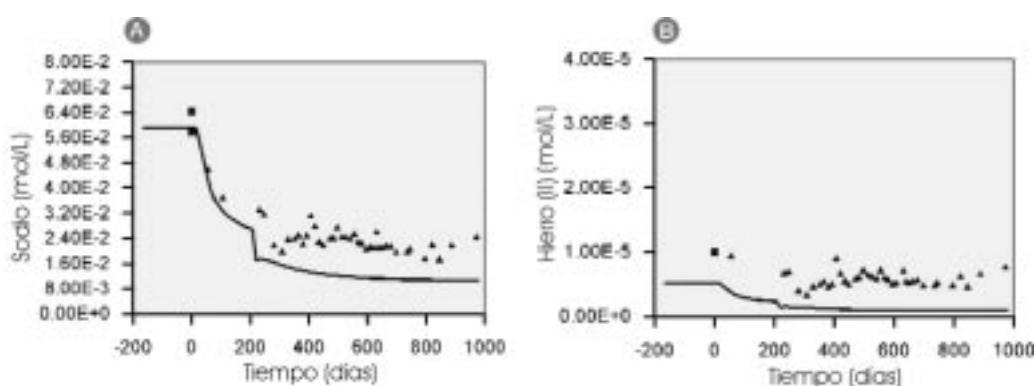


Fig. 22. Valores medidos (símbolos) y calculados (líneas) de las concentraciones de A) sodio y; B) hierro en el sondeo KR0015B (a 70 m de profundidad)

Fig. 22. Measured (symbols) and computed (lines) concentrations of: A) Sodium and B) Iron at borehole KR0015B (70 m depth)

ca en la constatación de que, para evitar incoherencias, los análisis cuantitativos de los datos hidroquímicos deberían basarse en modelos conceptuales hidrogeológicos sólidos. Además, los modelos numéricos de flujo y transporte de solutos aportan una herramienta valiosa para evaluar la coherencia entre los datos hidrodinámicos e hidroquímicos, permitiendo extraer el máximo de información de los datos obtenidos con los experimentos de campo a gran escala. Estos modelos constituyen a su vez la base para resolver modelos acoplados de flujo y transporte reactivo.

Agradecimientos

El presente trabajo ha sido realizado en el marco de proyectos de investigación financiados por la Empresa Nacional de Residuos S.A. de España (ENRESA) mediante el Proyecto Validación (703334), el Programa RADWAS de la Unión Europea (Proyecto FEBEX II, FIKW-CT-2000-0016) y por SKB. El acceso a la base de datos del Laboratorio Subterráneo de Äspö fue posible gracias al acuerdo de colaboración entre ENRESA y SKB. Los autores desean agradecer a Ignasi Puigdomenech y Peter Wikberg de SKB, su apoyo y estímulo constantes así como sus comentarios y sugerencias. También se desea dejar constancia del agradecimiento a Steve Banwart por haber compartido generosamente su experiencia en el experimento de la Zona Redox y haber estimulado el interés de los autores sobre el tema.

Referencias

- Banwart, S. 1999. Reduction of iron (III) minerals by natural organic matter in groundwater. *Geochimica et Cosmochimica Acta*. Vol 63, nº 19/20, 2919-2928.
- Banwart, S., Laaksoharju, M., Pitkänen, P., Snellman, M y Wallin, B. 1995. Development of a site scale model for reactive element dynamics. In: *The Redox Experiment in Block Scale*. Final Reporting of Results from the Three year Project. Chapter 6. Steven Banwart (Ed.). SKB Informe de Progreso 25-95-06.
- Banwart, S., Gustafsson, E. y Laaksoharju, M. 1999. Hydrological and reactive processes during rapid recharge to fracture zones. The Äspö large scale redox experiment. *Applied Geochemistry*, 14, 873-892.
- Banwart, S., Tullborg, E.-L., Pedersen, K., Gustafsson, E., Laaksoharju, M., Nilsson, A.-C., Wallin, B. y Wikberg, P. 1996. Organic carbon oxidation induced by large-scale shallow water intrusion into a vertical fracture zone at the Äspö Hard Rock Laboratory (Sweden). *Journal of Contaminant Hydrology*, 21, 115-125.
- Banwart, S., Gustafsson, E. Laaksoharju, M., Nilsson, A.-N., Tullborg, E.-L. y Wallin, B. 1994. Large-scale intrusion of shallow water into a vertical fracture zone in crystalline bedrock: Initial hydrochemical perturbation during tunnel construction at the Äspö Hard Rock Laboratory, southeastern Sweden. *Water Resources Research*, vol. 30, nº 6, 1747-1763.
- Bear, J. 1972. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. New York, Dover Publications Inc., 764 pp.
- Custodio, E. 1983. Relaciones agua dulce-agua salada en las regiones costeras. In: *Hidrología Subterránea*, Vol. II, Chapter 13. (Custodio, E. & Llamas, M.R.; Eds.) Ed. Omega, S.A. Barcelona. 1315-1385.
- Gustafsson, E., Andersson-Ludvigson, J.E. y Gentzschein, B. 1994. Pressure build-up interference tests in the Redox Fracture Zone. The Äspö Redox Experiment in Block Scale. In: *Hydraulic modelling and tracer tests in the Redox Experiment in the Äspö Hard Rock Laboratory Tunnel*. E. Gustafsson (Ed.). SKB Informe de progreso 25-94-37. Estocolmo.
- Hautojärvi, A.; Koskinen, L. y Löfman, J. 1994. Hydraulic modelling of the Large Scale Redox Experiment at Äspö HRL. In: *Hydraulic modeling and tracer tests on the Redox Experiment in the Äspö Hard Rock Laboratory tunnel*. (Gustafsson et al. Eds.). SKB Informe de progreso 25-94-37. Estocolmo.
- Laaksoharju, M. y Wallin, B. 1997. Evolution of the groundwater chemistry at the Äspö Hard Rock Laboratory. *Proceedings of the second Äspö International Geochemistry Workshop*, June 6-7, 1995. SKB, International Cooperation Report 97-04.
- Laaksoharju, M. (Ed.), Gustafsson, G., Pedersen, K., Rhén, I., Skarman, C., Tullborg, E.-L., Wallin, B. y Wikberg, P. (1995): *Sulphate reduction in the Äspö HRL tunnel*. SKB Technical Report, 95-25.
- Laaksoharju, M., Tullborg, E.-L., Wikberg, P., Wallin, B y Smellie, J. 1999. Hydrogeochemical conditions and evolution at the Äspö HRL, Sweden. *Applied Geochemistry*, 14, 835-860.
- Molinero, J. 2000. *Testing and validation of numerical models of groundwater flow, solute transport and chemical reactions in fractured granites: A quantitative study of the hydrogeological and hydrochemical impact produced by the construction of the Äspö Underground Laboratory (Sweden)*. Tesis Doctoral. Universidad de Coruña.
- Molinero, J., Samper, J., Montenegro, L. y Puigdomenech, I. 2000. Groundwater flow and reactive transport models in fractured granites: case study in the Äspö island system (Sweden). In: *Groundwater 2000* (Bjerg, P.; Engesgaard, P. and Krom.T. Eds). En: *Proceedings of the International Conference on Groundwater Research*, Copenague. A.A. Balkema. 111-112.
- Molinero, J., Samper, J. y Juanes, R. 2002. Numerical modeling of the transient hydrogeological response produced by tunnel construction in fractured bedrocks. *Engineering Geology*, 64, 369-386.
- Molinero, J. y Samper, J. 2003. *Modeling groundwater flow and solute transport in fracture zones: Reactive transport of the Redox Zone Experiment at Äspö (Sweden)*.

- En preparación.
- Molinero, J., Samper, J., Zhang, G. y Yang, C.B. 2003a. Coupled microbial reactive transport model of the redox zone experiment of the Äspö hard rock laboratory (Sweden). *Nuclear Technology*.
- Molinero, J., J. Samper, Ch. B. Yang y G. Zhang. 2003b. Modeling coupled chemical reactive transport and microbial processes in a fracture zone, En: 2003 International high-level radioactive waste management conference. Las Vegas, USA, pp. 307-315.
- Rhén, I., Bäckbom, G., Gustafson, G., Stanfors, R. y Wikberg, P. 1997. *Results from pre-investigations and detailed site characterization*. Summary report. SKB Informe técnico 97-03.
- Samper, J., Delgado, J., Juncosa, R. y Montenegro, L. 2000. *CORE2D v 2.0: A Code for non-isothermal water flow and reactive solute transport. User's manual version 2*. ENRESA Publicación Técnica 06/2000.
- Samper, J., J. Molinero, Ch. B. Yang y G. Zhang. 2003. *Redox Zone II: Coupled modelling of groundwater flow, solute transport, chemical reactions and microbial processes in the Äspö island*. Informe Técnico elaborado para Svensk Kärnbränslehantering AB (SKB). E. T. S. Ingenieros de Caminos. Universidad de Coruña, 119 pp.
- SKB. 1995. *This is how we manage Sweden's radioactive waste. Activities 1995*. Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company, SKB. Estocolmo.
- SKB. 1996. *Äspö Hard Rock Laboratory. 10 years of research*. Swedish Nuclear Fuel and Waste Management Company, SKB. Estocolmo.
- Smellie, J.A.T., Laaksoharju, M. y Wikberg, P. 1995. Äspö, SE Sweden: a natural groundwater flow model derived from hydrogeochemical observations. *Journal of Hydrology*, 172, 145-169.
- Svensson, U. 1997. *A regional analysis of groundwater flow and salinity distribution in the Äspö area*. SKB Informe técnico 97-09.
- Zhang, G. 2001. *Nonisothermal hydrobiogeochemical models in porous media*. Tesis Doctoral. Universidad de Coruña.

Recibido: Junio 2003

Aceptado: Septiembre 2003