

Coherencia de los modelos de flujo subterráneo y los modelos hidroquímicos de mezcla de aguas: aplicación a la Isla de Äspö (Suecia).

J. Molinero Huguet⁽¹⁾ y F. J. Samper Calvete⁽¹⁾

(1) Grupo de Hidrología Subterránea. E.T.S. Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos. Universidad de A Coruña Campus de Elviña s/n. 15192 A Coruña. E-mail: molinero@iccp.udc.es / samper@iccp.udc.es - <http://hydra.udc.es>

RESUMEN

Es una práctica muy extendida en hidrogeología el analizar y estudiar por separado los aspectos hidrodinámicos e hidroquímicos. La información hidrogeológica suele incorporarse de forma cuantitativa en modelos numéricos de flujo subterráneo, mientras que la información hidroquímica se suele interpretar cualitativamente o bien por medio de modelos de equilibrio químico y modelos de mezcla de aguas. En la construcción de modelos de flujo se suele tener en cuenta de forma cualitativa la información hidroquímica. Análogamente, la interpretación de los datos hidroquímicos e isotópicos se suele abordar considerando las líneas generales del flujo en los acuíferos. Sólo en casos muy concretos se ha abordado de forma cuantitativa la consistencia entre los resultados de un modelo de flujo y las conclusiones de la interpretación hidroquímica. En este artículo se presenta una metodología que permite evaluar la coherencia entre un modelo numérico hidrodinámico y un modelo hidroquímico de mezcla de aguas. Esta metodología requiere disponer de un conocimiento hidrogeológico suficiente como para construir un modelo de flujo y transporte de solutos, así como disponer de una base de datos hidroquímicos e isotópicos estadísticamente representativa del sistema. La evaluación de la coherencia se realiza en términos de fracciones de mezcla de distintos tipos de aguas. La metodología propuesta se aplicó para comparar un modelo hidrodinámico y otro hidroquímico que fueron realizados con el objetivo común de evaluar el impacto producido por la construcción de un túnel sobre el sistema hidrogeológico e hidroquímico de la isla de Äspö (Suecia). En el caso de la isla de Äspö se obtiene un elevado grado de coherencia entre los resultados de ambos modelos, lo cual se interpreta como una prueba de validación adicional para los dos modelos. El presente trabajo muestra además el potencial metodológico de la utilización combinada de ambos tipos de modelos. Mediante la incorporación en el modelo hidrodinámico de las fracciones de mezcla deducidas a partir de la hidroquímica, la metodología propuesta permite estudiar cuantitativamente las variaciones que se producen en las *facies* hidroquímicas cuando se inducen cambios en las condiciones hidrogeológicas.

Palabras clave: Modelos hidrodinámicos, Modelos hidroquímicos, Integración de la hidrogeología y la hidroquímica, Evaluación de la coherencia, Validación de modelos.

Coherence between groundwater flow models and hydrochemical mixing models: application to the Äspö Island (Sweden).

ABSTRACT

Hydrogeologic and hydrochemical data are usually analyzed and interpreted independently. Hydrogeologic information and data are often incorporated into groundwater flow models, while hydrochemical information is usually interpreted qualitatively or in some cases quantitatively by means of chemical equilibrium and/or mixing models. In this paper a methodology is presented to check the consistency between numerical hydrodynamic models and hydrochemical mixing models. Consistency is evaluated in terms of mixing fractions, which are derived from the statistical analysis of hydrochemical data. These mixing fractions are then introduced into the numerical flow and transport model. The ability of the hydrodynamic model to reproduce mixing fractions serves as a measure of the consistency between hydrodynamic and hydrochemical models. The proposed methodology has been used to compare a hydrodynamic model and a hydrochemical model of the Äspö Island (Sweden). These models were performed in order to evaluate the impact of a tunnel construction on the hydrogeology and hydrochemistry of the system. Results of the assessment of consistency show a high level of coherence, which constitutes an additional validation for both models. This paper also shows the potential of this methodology to integrate and combine hydrodynamic and hydrochemical data for regional aquifers. Incorporating hydrochemical model results into hydrodynamic numerical models allows one to study quantitatively the variations in hydrochemical facies induced by changes in flow patterns.

Key words: Hydrodynamic models, Hydrochemical models, Integration of hydrogeology and hydrochemistry, Consistency assessment, Model validation.

INTRODUCCIÓN

Para comprender el funcionamiento de sistemas hidrogeológicos normalmente se recurre al uso combinado de información geológica, geofísica, hidrológica, hidroquímica e isotópica. El análisis de esta información permite desarrollar modelos conceptuales acerca de la hidrogeología del sistema. Estos modelos conceptuales suelen incluir la definición de las zonas de recarga y descarga, las direcciones del subterráneo, la edad del agua así como la identificación de las principales interacciones agua-sólido. Aunque las hipótesis recogidas en el modelo conceptual puedan ser lógicas, en general es difícil evaluar su coherencia cuantitativa (Samper, 1986).

Normalmente se utilizan métodos independientes para el estudio cuantitativo de la información hidrodinámica e hidroquímica. De este modo, la información hidrodinámica se incorpora en modelos de flujo que relacionan las variaciones espaciales y temporales de los niveles piezométricos con las recargas, descargas y los parámetros de flujo. La información química, por otro lado, suele ser interpretada de forma cualitativa mediante diagramas y relaciones iónicas, o bien cuantitativamente por medio de modelos de equilibrio químico o con modelos de mezcla de aguas. Aunque las técnicas estadísticas también son ampliamente utilizadas, presentan limitaciones para el estudio de datos hidroquímicos ya que no son capaces de detectar relaciones no lineales entre variables y, además, sus resultados dependen del número de muestras disponibles (Samper, 1986). La información isotópica es utilizada generalmente para realizar dataciones del agua subterránea, así como para identificar procesos y zonas de recarga y descarga.

La integración de la información hidrológica e hidroquímica se puede realizar elaborando modelos de transporte de solutos. Estos modelos calculan las variaciones de las concentraciones químicas partiendo de un modelo de flujo al que se le añade la ecuación que describe la transferencia de masa. Sin embargo, la integración real existente entre la hidrodinámica y la hidroquímica del sistema es parcial, puesto que la mayor parte de dichos modelos de transporte se elaboran exclusivamente para el estudio de especies conservativas (ignorando los procesos químicos)

y además, raramente se aplican a escala regional de un acuífero, sino más bien a episodios puntuales relacionados con problemas de contaminación. Los modelos de flujo y transporte reactivo consideran de forma simultánea los procesos hidrodinámicos e hidroquímicos. Sin embargo, su utilización está todavía restringida a condiciones hidrogeológicas e hidroquímicas sencillas debido al gran número de parámetros necesarios y al elevado coste computacional requerido para la resolución numérica de los sistemas de ecuaciones resultantes.

En el estudio de sistemas complejos naturales es habitual llegar a situaciones en las que se dispone de modelos hidrodinámicos e hidroquímicos independientes. Sin embargo, si se plantean varios modelos de un mismo sistema sus resultados deberían ser coherentes entre sí, por muy diferentes que fuesen sus enfoques y planteamientos. Este tipo de situaciones han sido puestas de manifiesto en los últimos años dentro de la comunidad científica relacionada con las actividades del almacenamiento geológico de residuos radiactivos. De hecho, la Agencia de Energía Nuclear organizó en el año 1997 una reunión científica en Borgholm (Suecia), con el objetivo de promover la discusión sobre el uso de la información hidrogeoquímica en la evaluación y contraste de los modelos de flujo subterráneo (Nea, 1998). Una de las principales conclusiones de dicha reunión fue que la interpretación y modelización hidroquímica puede ser útil para evaluar la validez de los modelos de flujo subterráneo (Gautschi et al., 1998).

En el presente artículo se muestran los principales resultados obtenidos en un ejercicio de evaluación de la consistencia entre dos modelos existentes para la isla de Äspö (Suecia). Los modelos comparados utilizan enfoques distintos e independientes, aunque ambos fueron realizados con el objetivo común de evaluar el impacto de la construcción de un túnel sobre el sistema hidrogeológico circundante. El primer modelo es un modelo numérico de flujo y transporte de solutos. El segundo se basa exclusivamente en información hidroquímica e isotópica, que es analizada por medio de técnicas estadísticas multivariadas y cálculos de balance de masa (modelo hidroquímico de mezcla de aguas).

El modelo hidrodinámico se apoya en una serie de hipótesis sobre las condiciones iniciales y de contorno, así como en la información de parámetros hidrodinámicos obtenida a partir de ensayos hidráulicos. Por otra parte, el modelo hidroquímico de mezcla de aguas se construye a partir de un análisis estadístico de la información hidroquímica e isotópica.

El artículo comienza con la revisión de las metodologías utilizadas para la elaboración de ambos modelos (hidrodinámico e hidroquímico). Posteriormente se presenta un resumen del modelo numérico de flujo de la isla de Äspö. A continuación se describe la metodología propuesta para evaluar la coherencia entre los resultados del modelo de flujo y transporte y las hipótesis derivadas del enfoque hidroquímico. Se concluye indicando el potencial de aplicación en hidrogeología de la metodología presentada.

EL PROCESO DE MODELIZACIÓN HIDRODINÁMICA

Un modelo es una representación simplificada de un sistema real. Los modelos son herramientas que ayudan a encontrar explicaciones para las observaciones disponibles y a evaluar los efectos producidos por acciones externas al sistema. Por lo tanto, los modelos son útiles para entender sistemas complejos y/o para intentar reproducirlos. En un sentido amplio, los modelos se pueden clasificar en dos grandes grupos: modelos mecanicistas o físicos y modelos de "caja negra". En los modelos mecanicistas se intenta explicar "la realidad" a través de un entendimiento de los procesos físicos del sistema. Los modelos de "caja negra" proporcionan una herramienta capaz de reproducir la respuesta del sistema a unas acciones determinadas sin considerar los procesos físicos responsables de dicha respuesta. Aunque los modelos de "caja negra" pueden ser capaces de reproducir un sistema de una manera muy precisa, en general no ayudan a comprenderlo. Ejemplos típicos de modelos de "caja negra" son los modelos estadísticos y los modelos de redes de neuronas artificiales.

La utilización de modelos en hidrología subterránea no es algo exclusivo de nuestros días. El famoso experimento de Darcy (1856) constituye

posiblemente el primer modelo de la historia de la hidrogeología. Este tipo de modelos de maqueta o modelos reducidos han sido y son muy empleados en ingeniería hidráulica. A mediados del siglo XX comenzaron a aparecer otro tipo de modelos conocidos como los modelos analógicos. Los modelos analógicos más comunes en hidrogeología son los modelos eléctricos, que aprovechan la analogía existente entre la ley de Darcy y la ley de Ohm. De esta manera, el sistema hidrológico subterráneo es reproducido por medio de un sistema eléctrico análogo (Álvarez et al., 1983).

Cuando el sistema hidrogeológico se intenta reproducir a través de la resolución de las ecuaciones que describen los procesos físicos (o químicos) que ocurren en los acuíferos, se habla de los modelos matemáticos. En ciertos casos de geometría y condiciones iniciales y de contorno sencillas, las ecuaciones en derivadas parciales de un modelo matemático se pueden resolver mediante soluciones analíticas. En general, sin embargo, hay que recurrir a métodos numéricos de solución. El espectacular avance experimentado por la tecnología de la computación en las últimas décadas ha propiciado la proliferación de sofisticadas herramientas capaces de resolver los modelos matemáticos usando técnicas numéricas. Los modelos numéricos son aquellos que, renunciando de antemano a la solución exacta del problema, buscan un conjunto discreto de soluciones "aproximadas" obtenidas mediante métodos numéricos. La precisión del modelo numérico depende, fundamentalmente, de la discretización espacio-temporal. Se remite al lector interesado en el uso y el estado del conocimiento actual de los modelos numéricos en hidrología subterránea a Samper (1994) y Samper et al. (1999).

Para la elaboración de un modelo numérico en hidrogeología se sigue una metodología similar a la utilizada en otras disciplinas relacionadas con el estudio del terreno (Figura 1).

La modelización comienza con una conceptualización del sistema, conocida como el establecimiento del modelo conceptual. Un modelo conceptual es una descripción cualitativa del sistema real y conlleva básicamente la identificación de los procesos y de la estructura del sistema. Es

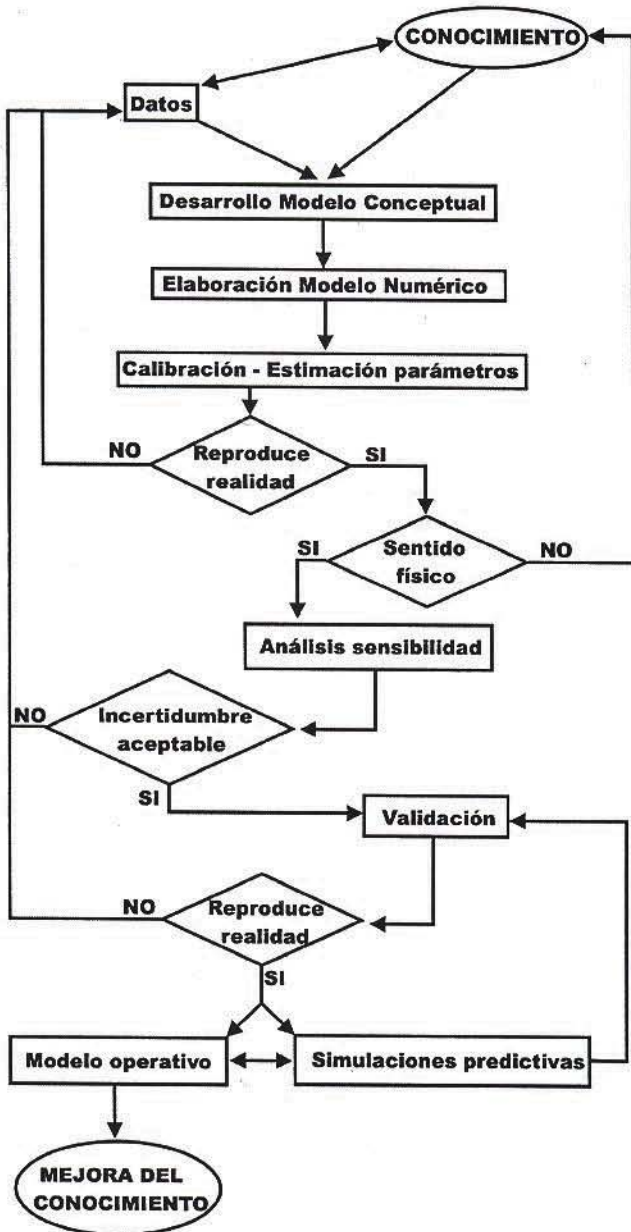


Figura 1. Metodología de la modelización numérica (modificada de Samper, 1993).

esencial disponer de un buen modelo conceptual puesto que condiciona el desarrollo del resto de las etapas de la modelización. Corregir un error en el modelo conceptual conlleva formular otro modelo diferente. Una vez establecido el modelo conceptual se elabora el modelo numérico. El pri-

mer paso de la modelización numérica consiste en la discretización espacial y temporal del problema, la definición de las condiciones iniciales y de contorno así como la asignación de los parámetros. La resolución de las ecuaciones numéricas se realiza mediante un programa de cálculo (código). Existen diversos programas de ordenador para resolver modelos numéricos hidrogeológicos como por ejemplo MODFLOW (McDonald y Harbaugh, 1988), MT3D (Zheng, 1990), TRANSIN III (Galarza et al., 1994), TRANMEF-3 (Juanes, 1997) y CORE-LE (Samper et al., 1998) entre muchos otros. Existen recopilaciones exhaustivas de códigos disponibles (ENRESA, 1991). Sin embargo, no todos los programas tienen las mismas capacidades ni son igualmente versátiles. En cualquier caso, el programa que se utilice debe estar verificado. Por verificación se entiende el proceso de comprobar de forma sistemática que un código resuelve de manera precisa las ecuaciones que se supone debe resolver (Samper et al., 1997). Por lo tanto, verificación es un concepto relacionado con el código y no con el modelo en sí. Usar un código verificado es una condición imprescindible para elaborar un modelo numérico adecuado (Carrera y Samper, 1989).

En la mayoría de los casos un modelo numérico debe ser calibrado. La calibración es necesaria puesto que generalmente no se dispone de información detallada de todos los parámetros y condiciones iniciales y de contorno. Generalmente se utiliza como criterio de calibración el ajuste entre los valores calculados por el modelo y los datos medidos. La calibración puede conducir a resultados inadecuados e incluso a conclusiones improbables o sin sentido, lo cual puede sugerir en ciertos casos una revisión del modelo conceptual. La calibración se puede realizar manualmente, por tanteos sucesivos, o bien a través de algoritmos de calibración automática (Carrera, 1987; Medina y Carrera, 1996), lo cual se conoce como modelización inversa. Si la calibración conduce a resultados satisfactorios se puede decir que el modelo está terminado, pero no el proceso de modelización (Figura 1).

Un modelo numérico presenta dos ventajas fundamentales en comparación con cualquier otro tipo de hipótesis científica. La primera es que el modelo numérico es cuantitativo y reproducible.

La segunda es que permite realizar fácilmente análisis de sensibilidad. Según Oreskes et al. (1994) el proceso del análisis de sensibilidad es una capacidad que permite explorar "qué ocurre si...". Se dice que un modelo es sensible con respecto a un parámetro o condición, cuando variaciones razonables del valor de dicho parámetro o condición alteran considerablemente los resultados calculados. Por lo tanto, un análisis de sensibilidad que tenga en cuenta las incertidumbres del modelo permite cuantificar el margen de confianza de los resultados del modelo.

Científicamente hablando es imposible demostrar que un modelo numérico es cierto. Sin embargo esto no es una característica de los modelos sino de cualquier hipótesis científica. Esta es la razón por la que cuando se habla de modelos se usa el término "validación" en lugar de "demostración". No existe consenso en cuanto al significado de validar un modelo. En el ámbito de la gestión de residuos nucleares se entiende por validación de un modelo "la confirmación de que el modelo proporciona una buena representación de los procesos que realmente suceden en el sistema" (IAEA, 1992). Según Grenthe y Puigdomenech (1997) la validación es "un proceso que no denota necesariamente el establecimiento de la verdad, pero que implica que el modelo no contiene defectos o errores detectables de lógica". Los ejercicios de validación son útiles porque permiten aumentar la confianza en la capacidad predictiva de los modelos. La práctica de validación más común es la comparación de los resultados del modelo con datos de campo no usados en la calibración. Otra posibilidad es lo que se conoce como ejercicios de post-auditoría del modelo (Andersson y Woessner, 1992), es decir, comparar los cálculos predictivos del modelo realizados en el pasado con los datos medidos en campo posteriormente.

La modelización hidrogeológica de medios fracturados es más compleja que la de los medios porosos. Siguiendo la clasificación propuesta por Berkowitz et al. (1994) existen tres tipos principales de modelos para la conceptualización del flujo y el transporte de solutos a través de medios fracturados:

1.- **Los modelos continuos** consideran la totalidad del medio fracturado como un medio poroso

equivalente. Esta aproximación es válida y aplicable cuando existe y es posible definir un volumen elemental representativo (VER) para el problema de interés. Por lo tanto, estos modelos son aplicables dependiendo de la escala del problema y del grado de interacción que exista entre las fracturas y los bloques porosos.

2.- **Los modelos de redes de fracturas discretas** consideran los procesos de flujo y transporte en fracturas aisladas, despreciando la contribución de los bloques rocosos (matriz). El estudio de diversos problemas utilizando este enfoque ha proporcionado avances muy importantes en el conocimiento de los fenómenos de flujo y transporte en medios fracturados (Berkowitz, 1994). Su limitación radica en las dificultades para la definición geométrica de las redes de fracturas. Generalmente se recurre a realizaciones estocásticas (condicionadas o no a datos de campo) o bien a la combinación de sistemas determinísticos con las realizaciones estocásticas. En sentido amplio, se pueden incluir en este grupo los modelos de redes de canales propuestos por Moreno et al. (1988).

3.- **Los modelos híbridos** representan una alternativa intermedia o mixta de los dos enfoques anteriores. Estos modelos postulan una solución de compromiso, que consiste en incorporar las fracturas hidrodinámicamente más relevantes superpuestas o conectadas con un medio continuo (medio poroso equivalente) que representa el resto del dominio.

LOS MODELOS HIDROQUÍMICOS DE MEZCLA DE AGUAS

Los modelos de mezcla de aguas son utilizados en estudios hidroquímicos de sistemas hidrogeológicos en los que existen mezclas de aguas de composiciones marcadamente diferentes. Uno de los ejemplos más frecuentes de aplicación de modelos de mezcla es el estudio de los fenómenos de intrusión de agua marina en acuíferos costeros. Cuando se mezclan dos aguas extremas (A y B) cuyas composiciones químicas son claramente diferenciables, la composición química de la mezcla resultante (M) varía sistemáticamente dependiendo de la abundancia relativa de cada uno de los componentes extremos. Por

lo tanto, la concentración de cualquier elemento conservativo (X) en una mezcla binaria entre A y B dependerá de las concentraciones de dicho elemento en los componentes extremos y de las abundancias de cada uno de los componentes extremos en la mezcla. De este modo, la concentración del elemento X en la mezcla M, $(X)_M$, viene dada por:

$$(X)_M = (X)_A f_A + (X)_B (1-f_A)$$

donde f_A es el factor de mezcla, es decir, la abundancia relativa del componente A en la mezcla. De este modo, conociendo las concentraciones de una especie conservativa cualquiera de la mezcla y conocidas las composiciones químicas de los componentes extremos, es posible deducir la abundancia relativa de dichos componentes extremos en la mezcla estudiada.

La aplicación de este tipo de modelos de mezclas binarias es útil para establecer modelos conceptuales en estudios hidrogeológicos, así como para evaluar el posible papel de procesos químicos en la composición de las aguas subterráneas. Habitualmente, los factores de mezcla deducidos a partir de especies conservativas (como por ejemplo el ion cloruro) se aplican para predecir las concentraciones teóricas del resto de los elementos químicos no conservativos. Comparando las composiciones teóricas calculadas y las composiciones medidas se pueden cuantificar las fuentes y/o sumideros de cada una de las especies químicas en las diferentes muestras. Las desviaciones positivas indican la existencia de procesos químicos de aporte de masa de las fases sólidas y viceversa.

Los modelos de mezcla con variable única resultan inadecuados cuando existen más de dos aguas extremas, puesto que se requiere conocer más de un factor de mezcla. Smellie y Laaksoharju (1992) realizaron modelos de mezclas binarias para estudiar el sistema hidrogeológico de la isla de Åspö y encontraron que muestras de agua que tenían las mismas concentraciones de cloruro mostraban a su vez concentraciones muy distintas de otras especies conservativas como el ^{18}O o el bromuro, lo cual evidenciaba la influencia de más de dos tipos de aguas con diferentes orígenes. Para descifrar la

información de un sistema como éste es necesario utilizar técnicas que tengan en cuenta más de una variable.

Laaksoharju (1999 a,b) y Laaksoharju (1999) desarrollaron una metodología llamada M3 (*Multivariate, Mixing and Mass Balance*) que requiere realizar un análisis de componentes principales. El análisis de componentes principales es una técnica estadística multivariable, basada en el estudio de las direcciones principales de la matriz de covarianza de los datos (Samper y Neuman, 1987). Laaksoharju (1999 a,b) utilizaron los datos de los componentes mayoritarios (Cl^- , Ca^{2+} , Na^+ , Mg^{2+} , K^+ , SO_4^{2-} y HCO_3^-) junto con algunos isótopos ($\delta^2\text{H}$, $\delta^{18}\text{O}$ y ^3H) para facilitar la síntesis de las relaciones existentes entre las variables y las muestras de agua disponibles en Åspö. El resultado del análisis multivariable se visualizó en un gráfico (gráfico PCA) en el que cada muestra de agua aparece representada en función de sus dos componentes principales. Este gráfico fue utilizado para analizar tendencias y discriminar posibles aguas extremas (Figura 2).

Dentro del gráfico PCA, la posición de cada muestra de agua está determinada por su composición química, de forma que muestras con una composición similar están cercanas entre sí y distantes de otras con composiciones diferentes. Los puntos extremos en el gráfico PCA pueden ser definidos como aguas de referencia o miembros extremos (*end members*). Laaksoharju et al. (1999 b) definen un miembro extremo como un agua original extrema del sistema, mientras que un agua de referencia es una muestra disponible (medida) que se puede considerar muy parecida a un miembro extremo. En la Figura 2 se muestra un gráfico PCA en el que se representan las muestras de agua disponibles en Åspö. En dicho gráfico se identifican las posibles aguas de referencia así como los miembros extremos propuestos por Laaksoharju et al. (1999 b). Por ejemplo, el agua de referencia Glaciar corresponde a una muestra de agua en la que se determinó el valor más negativo de $\delta^{18}\text{O}$ (agua muy pesada), cuyo miembro extremo se supone que es el agua proveniente de la fusión de los glaciares hace aproximadamente 20000 años. La Figura 3 muestra un ejemplo de dos posibles modelos capaces de explicar las muestras de agua recogidas en

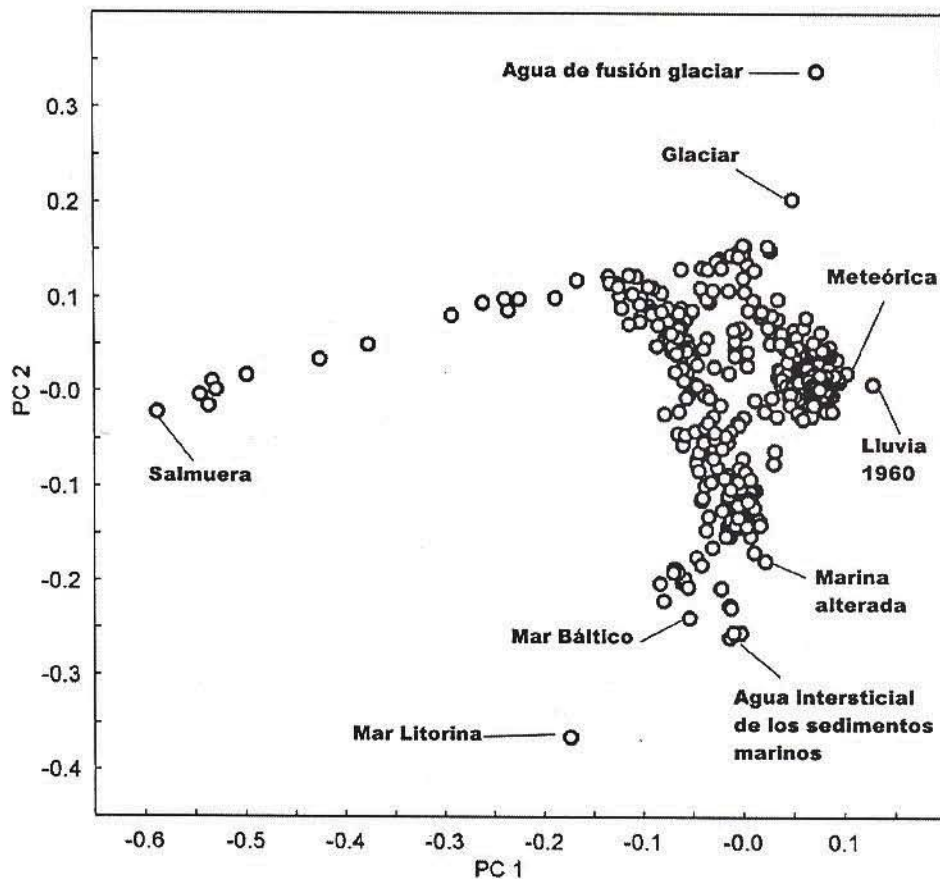


Figura 2. Gráfico PCA con las muestras de agua recogidas en Äspö representadas en función de los dos primeros componentes principales (PC1 y PC2). Selección de aguas extremas en el caso de Äspö. Algunas de ellas corresponden a aguas de referencia medidas (por ejemplo, glaciár o meteórica), mientras que otras son miembros extremos supuestos (por ejemplo, agua de fusión glaciár o agua del mar Litorina). (Modificada de Laaksoharju, 1999).

Äspö. El primer modelo se definió en base a aguas de referencia (composiciones medidas en el campo), mientras que el segundo modelo (llamado modelo alternativo, en la Figura 3) fue definido en base a miembros extremos (composiciones asumidas o modelizadas).

Posteriormente se realizan los cálculos de fracciones de mezcla para determinar las proporciones de las aguas extremas existentes en cada una de las muestras de agua disponibles. Estos cálculos de porcentajes de mezcla son cálculos no estadísticos. Los porcentajes de mezcla en cada muestra de agua se determinan a partir de las distancias trigonométricas existentes entre la muestra y los diferentes extremos del modelo

(Figura 3). Dichos porcentajes miden la contribución teórica (ideal) de cada una de las aguas extremas a cada una de las muestras de campo disponibles.

Finalmente, se realizan los cálculos de balances de masa para evaluar las posibles fuentes y/o sumideros en cada muestra. A partir de los porcentajes de mezcla y de la composición química de las aguas extremas, es posible calcular la composición teórica de cada una de las muestras de agua. Si no existen diferencias entre la composición teórica y la real se puede decir que la composición de dicha muestra de agua puede ser explicada por la mezcla ocurrida entre las aguas extremas. Los excesos o defectos detectados

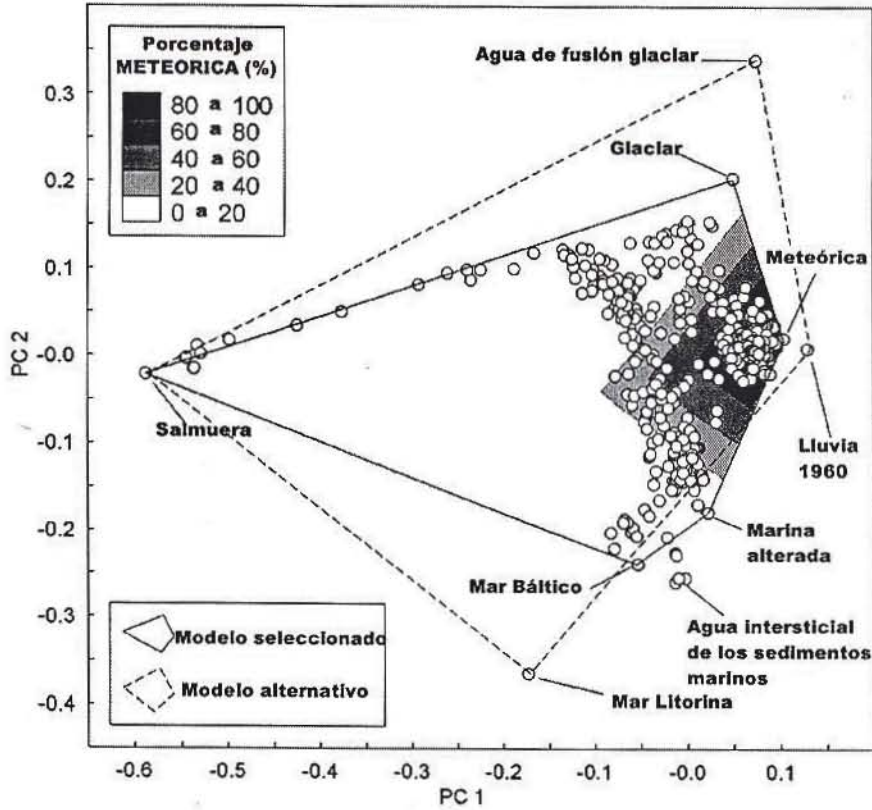


Figura 3. Selección del modelo de mezcla: se pueden adoptar diferentes modelos dependiendo de las aguas extremas que lo definen. Tras seleccionar el modelo se calculan los porcentajes de mezcla con respecto a cada una de las aguas extremas. (Modificada de Laaksoharju, 1999).

para cada especie química en cada una de las muestras de agua pueden ayudar a detectar la influencia de procesos químicos que afectan a las aguas subterráneas. En la Figura 4 se han representado las desviaciones calculadas por Laaksoharju et al. (1999 b) para los bicarbonatos. Se puede observar cómo existen dos grupos de puntos claramente diferenciados, uno en el que las muestras presentan excesos y otro en el que se detectan desviaciones negativas de bicarbonatos, respecto a la composición ideal de la mezcla.

Usando la metodología M3, Laaksoharju et al. (1999 b) concluyen que las aguas subterráneas de Äspö pueden ser explicadas a partir de la mezcla de cinco aguas de referencia (Figuras 3 y 4): 1) agua del Mar Báltico, 2) agua meteórica, 3) agua marina alterada, 4) agua glacial y 5) agua salina profunda (salmuera). Del análisis de las fuentes y

sumideros químicos calculados y con las evidencias encontradas en los estudios de campo, dichos autores concluyen además que los procesos químicos más relevantes que afectan a las aguas subterráneas de Äspö son: (1) la disolución y precipitación de calcita, (2) la degradación de la materia orgánica catalizada por bacterias reductoras de hierro y (3) los procesos de intercambio iónico entre calcio y sodio, fundamentalmente.

EL MODELO HIDRODINÁMICO DE LA ISLA DE ÄSPÖ (SUECIA)

Motivación

El Laboratorio Subterráneo de la isla de Äspö (Äspö HRL) constituye una parte fundamental del trabajo que se está realizando en Suecia para el

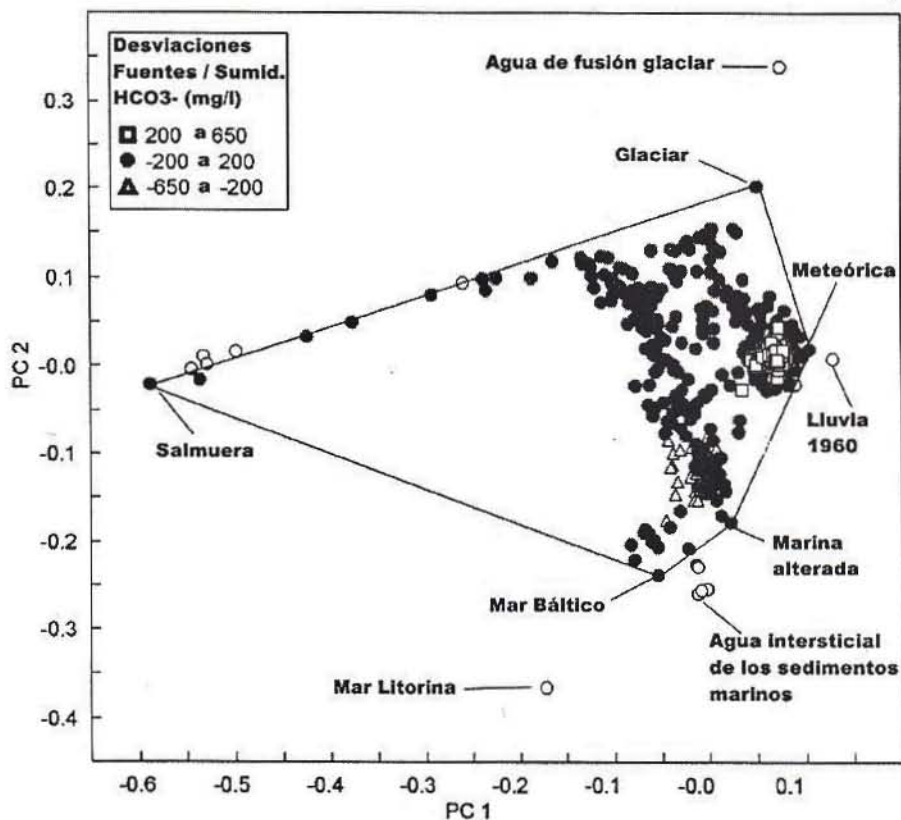


Figura 4. Cálculos de balances de masa: se calculan las fuentes y sumideros de cada elemento en cada una de las muestras por comparación entre las composiciones químicas teóricas y reales. Estas fuentes y sumideros ayudan a detectar la posible influencia de procesos químicos. (Modificada de Laaksoharju, 1999).

desarrollo de un almacenamiento geológico profundo de residuos radiactivos, con el doble propósito de investigación y de demostración tecnológica. En otoño de 1986 la empresa sueca encargada de la gestión de los residuos radiactivos (SKB) inició los trabajos de campo para la ubicación de un laboratorio subterráneo. A finales de ese mismo año SKB decidió situar el laboratorio en la parte sur de la isla de Äspö. Posteriormente, tras las etapas de revisión y aprobación, en el otoño de 1990 comenzaron los trabajos de construcción de las instalaciones.

El principal objetivo del laboratorio es llevar a cabo los trabajos de investigación, desarrollo y demostración que permitan concluir la idoneidad y viabilidad de la construcción de un almacenamiento profundo de residuos radiactivos en un medio granítico fracturado. Para alcanzar dicho

objetivo se están realizando tareas de investigación en geotecnia, hidrogeología e hidroquímica.

En otoño de 1992, dentro de las actividades relacionadas con el Laboratorio Subterráneo de Äspö se constituyó la denominada "Task Force on Modelling of Groundwater flow and Transport of solutes", cuyo objetivo consiste en fomentar la interacción entre las diferentes compañías y organizaciones participantes en el laboratorio subterráneo. Este foro promueve el debate e intercambio científico en temas relacionados con la modelización conceptual, matemática y numérica de flujo subterráneo y transporte de solutos en medios fracturados. España participa en dicho foro a través de la Empresa Nacional de Residuos Radiactivos, S.A. (ENRESA), cuya representación fue otorgada al Grupo de Hidrología Subterránea de la Universidad de A Coruña. Las actividades

científicas relacionadas con el Laboratorio Subterráneo de la isla de Äspö han permitido la obtención de una extensa base de datos hidrogeológicos e hidroquímicos, quizá sin precedentes en el mundo, que permiten el estudio en detalle del impacto producido por la construcción del túnel sobre el sistema hidrogeológico circundante.

Modelo Conceptual

La isla de Äspö se encuentra situada en la parte sur oriental de Suecia, aproximadamente a 400 km al sur de Estocolmo (Figura 5). Concretamente, el laboratorio se localiza en la comarca de Simpevarp en las proximidades de la central nuclear sita en el municipio de Oskarshamn. Geográficamente la isla de Äspö forma parte de un archipiélago costero granítico situado en el Mar Báltico, cuyas islas están separadas de la Península Báltica por brazos marinos muy someros.

Las instalaciones del laboratorio subterráneo constan de un túnel de 3600 m de longitud, que va desde la superficie hasta 450 m de profundidad, con un primer tramo recto y un segundo tramo de geometría espiral (Figura 5). Encima de este segundo tramo espiral, sobre la superficie de la isla de Äspö, se encuentran los edificios e instalaciones de investigación, los cuales están conectados con el túnel por medio de un ascensor (Figura 5).

El laboratorio está ubicado dentro de la amplia región del Cinturón Porfírico-granítico Transescandinavo. Esta zona se caracteriza por un amplio número de macizos básicos alineados en dirección E-W, dentro de los cuales existen cuerpos irregulares de vulcanitas, xenolitos y diapiros graníticos semicirculares. La isla de Äspö constituye el afloramiento de uno de estos diapiros graníticos que está formado mayoritariamente por lo que se conoce en sentido amplio como granitos de Smalan. Estos granitos, forman un complejo de diversas litologías (desde dioritas hasta granitos en sentido estricto) de aproximadamente 1700-1800 millones de años de antigüedad.

Los estudios geológico-estructurales de la zona

de Äspö muestran la existencia de más de 20 grandes zonas de fractura que presentan un amplio rango de orientaciones y estilos (Rhén et al. 1997 b). La mayoría de estas zonas de fractura corresponden a zonas de deformación semidúctil precámbrica reactivadas en etapas tectónicas posteriores en las que se produjo la deformación frágil.

La superficie topográfica de la isla de Äspö es suave y ondulada con una altura máxima de 14 m sobre el nivel del mar. No existen arroyos perennes en la isla y el agua de lluvia es drenada rápidamente al mar por escorrentía superficial o bien subsuperficialmente a través de sedimentos someros y turberas (Rhén et al. 1997 b). La precipitación media anual es del orden de 675 mm de los cuales el 18% cae en forma de nieve. La evapotranspiración potencial anual es de 616 mm y la real de 490 mm (Rhén et al. 1997 b). No existen datos de escorrentía superficial en la isla de Äspö, pero en la zona cercana de Simpevarp (Figura 5) se estima que el valor medio anual es de 150-200 mm, lo cual deja un escaso margen para el valor de la recarga.

Las principales zonas de fractura son las que controlan la recarga, la descarga y el flujo subterráneo del entorno del Laboratorio Subterráneo de Äspö (Smellie et al., 1995). El nivel freático en condiciones naturales oscila entre 0 y 4 m sobre el nivel del mar, adaptándose de forma suavizada a la topografía. La construcción del túnel produjo un descenso importante de los niveles piezométricos con máximos de hasta 100 m. Los niveles piezométricos se estabilizaron una vez terminada la construcción del túnel en febrero de 1995 (Stanfors et al., 1999).

Tras más de 10 años de trabajos de caracterización hidrogeológica, Rhén et al. (1997 b) propusieron un modelo conceptual hidrogeológico del entorno del laboratorio. Este modelo a escala local se basa en la existencia de:

1.- **Dominios hidráulicos conductores (HCD).** Son grandes planos (2D) con propiedades hidráulicas diferentes a las de las rocas que los rodean (Figura 6). Generalmente coinciden con las principales zonas de fractura definidas por el modelo geológico-estructural, aunque en algunos casos su definición está hecha a partir de evidencias

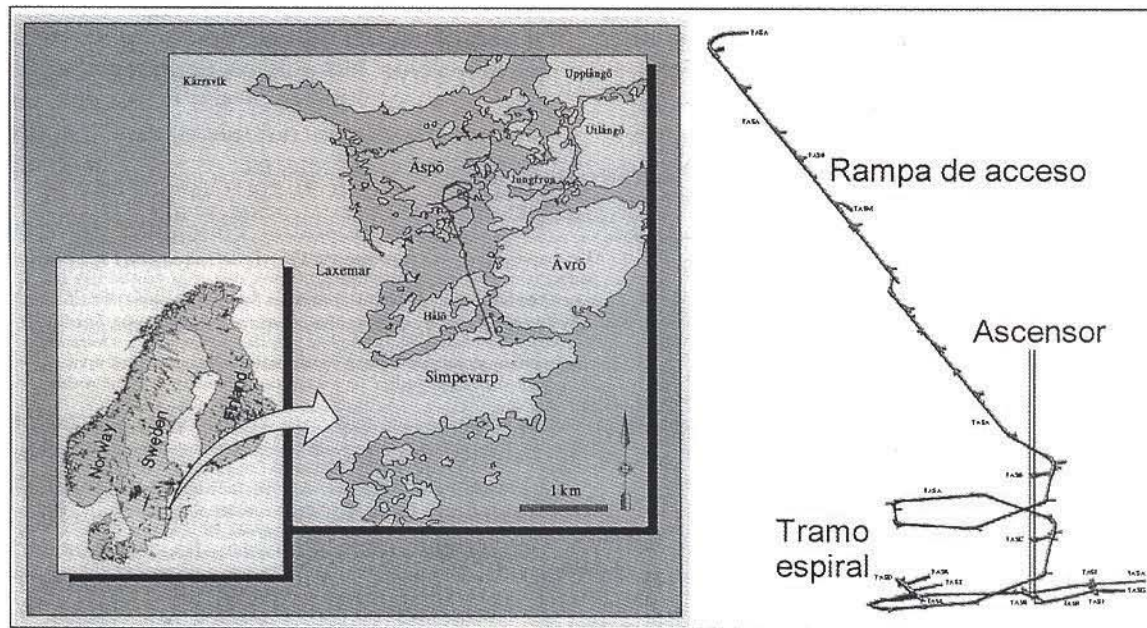


Figura 5. Situación geográfica del entorno de la isla de Äspö y proyección en superficie del túnel del laboratorio subterráneo (izquierda). Esquema tridimensional de las instalaciones subterráneas (derecha). (Modificada de Rhén et al., 1997a)

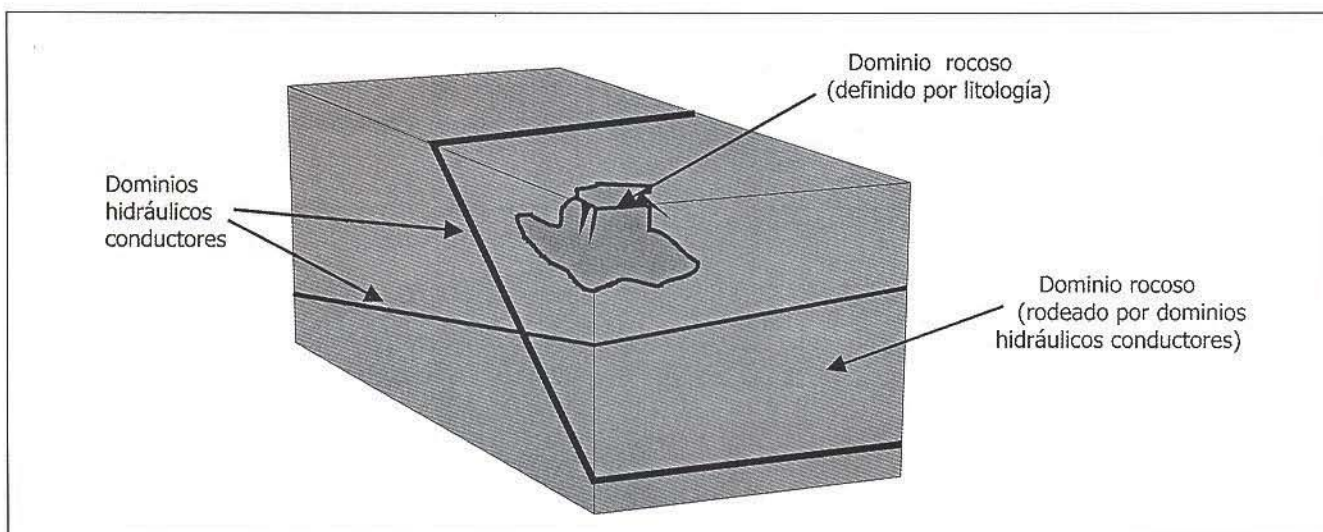


Figura 6. Descripción esquemática de los dos conceptos geométrico-hidrológicos fundamentales: dominios hidráulicos conductores y dominios rocosos.

estrictamente hidrogeológicas (ensayos hidráulicos de interferencia y ensayos de trazadores).

2.- **Dominios rocosos (RD).** Son grandes volúmenes (3D) con propiedades hidráulicas diferentes a los dominios que los rodean (Figura 6). Estos

dominios se definieron atendiendo a criterios geológico-litológicos, así como a evidencias hidrogeológicas (interpretación de ensayos hidráulicos).

Los trabajos de caracterización hidrogeológica de

la zona han proporcionaron una extensa base de datos sobre parámetros de flujo y, en menor medida, de transporte de solutos. La transmisividad media para los dominios hidráulicos conductores es del orden de $10^{-5} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ con un valor máximo de $3 \times 10^{-4} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. El valor medio de la conductividad hidráulica de los dominios rocosos es de $3 \times 10^{-10} \text{ m s}^{-1}$. Teniendo en cuenta que el espesor de los dominios hidráulicos conductores varía entre 10 y 50 m, se puede concluir que estos dominios (grandes zonas de fractura) son entre 3 y 4 órdenes de magnitud más permeables que el resto del macizo granítico.

El exhaustivo modelo geológico-geométrico de Äspö permite la localización precisa de una serie de zonas de fractura a través de las cuales se concentra la mayor parte del flujo subterráneo (Rhén et al., 1997 b). Por este motivo, en este trabajo se adoptó un modelo conceptual basado en el enfoque de redes de fracturas discretas como base para el modelo numérico. Geométricamente el modelo consta de 20 dominios hidráulicos conductores bidimensionales situados dentro de un volumen de $2 \times 2 \text{ km}$ en planta y 1 km de profundidad (Figura 7). La mitad de estos dominios hidráulicos conductores (11) son intersecados por el túnel en 29 puntos. En el tramo espiral, el túnel interseca algunas zonas de fractura a dife-

rentes profundidades. En la Figura 7 se muestra la geometría del modelo conceptual considerado, los dominios hidráulicos conductores, la ubicación del túnel y del ascensor de acceso, así como las intersecciones del túnel con los dominios hidráulicos conductores.

El modelo conceptual considera los siguientes procesos físicos: (1) flujo darcyano a través de los dominios hidráulicos conductores, y (2) transporte de solutos por advección, dispersión mecánica y difusión molecular.

Es bien conocido que en zonas costeras y en condiciones naturales las variaciones de densidad afectan de manera importante al flujo de agua (Custodio, 1983). Sin embargo, en el caso que nos ocupa, los gradientes hidráulicos inducidos por la construcción del túnel del laboratorio subterráneo predominan sobre los efectos producidos en el flujo por las variaciones de densidad. Hautojärvi et al. (1994) modelizaron la influencia de la construcción del túnel de Äspö en el sistema hidrogeológico de una zona de fractura intersecada por el túnel a 70 m de profundidad, concluyendo que una vez alterado el sistema por la presencia del túnel, los efectos de las variaciones de densidad (debidos a los cambios de salinidad) en las presiones intersticiales son casi ina-

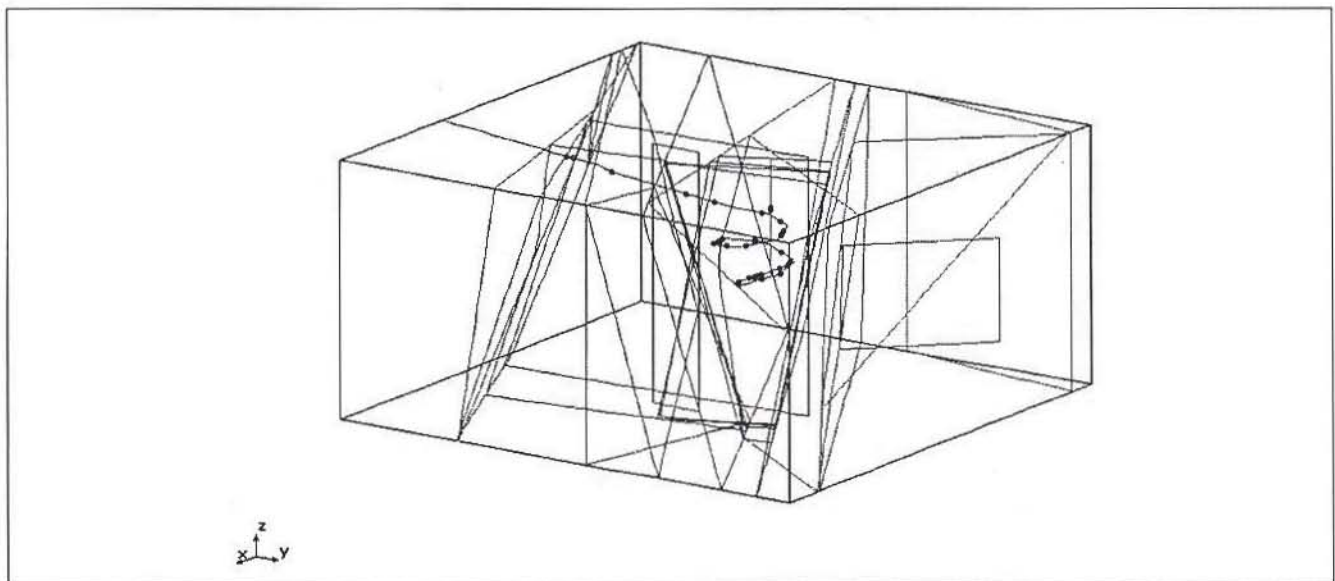


Figura 7. Geometría del modelo conceptual hidrodinámico. En la figura se representan los 20 dominios hidráulicos conductores, el túnel, el ascensor y sus intersecciones.

preciables incluso a 600 m de distancia (del túnel). Por este motivo, en el modelo de flujo que se expone a continuación se ignoró el efecto de las variaciones de la densidad del agua provocadas por cambios en su salinidad.

Modelo Numérico

El dominio se discretizó usando elementos finitos cuadrangulares y triangulares para los dominios conductores, y lineales para el túnel y el ascensor (Figura 8). La malla adoptada consta de 12847 nudos y 14237 elementos (Figura 8). Para resolver el modelo numérico se utilizó el código TRANMEF-3 (Juanes, 1997; Juanes y Samper, 2000) desarrollado en la Universidad de A Coruña. Las condiciones iniciales se supusieron hidrostáticas para el flujo de agua. Las distribuciones iniciales de las concentraciones químicas se generaron por interpolación de la información existente para las condiciones inalteradas del sistema (antes de la construcción del túnel). Las condiciones de contorno empleadas incluyen: (1) nivel y concentración impuesta en los límites laterales y en el mar, (2) límite impermeable en el contorno inferior (a 1 km de profundidad) y (3) recarga areal de 5 mm/año en las islas. El avance

de la construcción del túnel se simuló dinámicamente usando condiciones de contorno internas variables en el tiempo (Molinero et al., 2000a).

Se realizó una detallada y sistemática calibración del modelo de flujo basada en la comparación de los valores calculados con los caudales medidos en el túnel y los niveles piezométricos medidos en sondeos perforados desde la superficie de la isla. Los valores de los parámetros de flujo obtenidos tras la calibración se encontraron dentro de los rangos de valores estimados en los ensayos hidráulicos, excepto para 2 de las 20 fracturas, en los que se utilizaron valores de transmisividad ligeramente inferiores a los deducidos en los ensayos de campo. Por el contrario, no fue preciso calibrar el modelo de transporte de solutos debido a que usando los parámetros de campo disponibles se obtuvieron resultados satisfactorios. El modelo numérico fue validado, tanto en su componente de flujo subterráneo como en la de transporte de solutos, por comparación con datos adicionales no utilizados durante la calibración. Los detalles sobre la modelización numérica pueden consultarse en Molinero et al. (2000 a,b). En las Figuras 9 y 10 se muestran ejemplos de la comparación entre los valores medidos y calculados de caudales, niveles piezométricos y

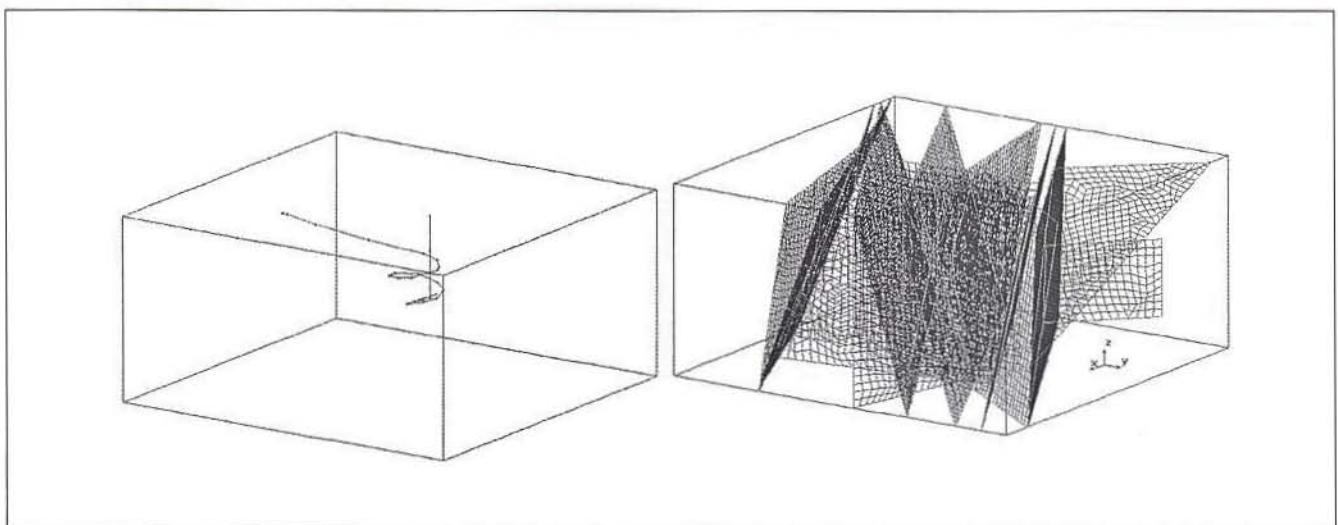


Figura 8. Discretización espacial adoptada para el modelo numérico hidrodinámico. Elementos finitos unidimensionales (lineales) para el túnel y el ascensor (izquierda), y bidimensionales (cuadrangulares y triangulares) para los dominios hidráulicos conductores (derecha).

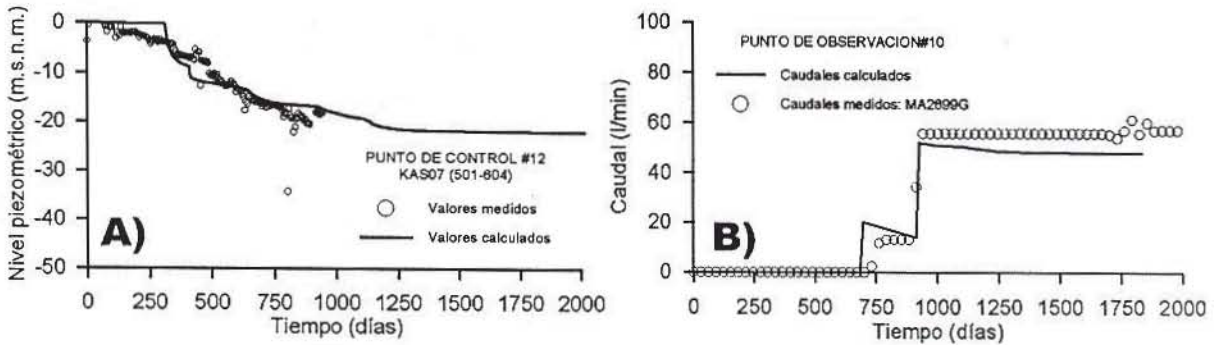


Figura 9. A) Comparación entre los valores calculados y los valores medidos de niveles piezométricos en un tramo de sondeo a 550 m de profundidad. B) Comparación entre los caudales calculados y los medidos en un tramo del túnel situado a 2700 m de la entrada.

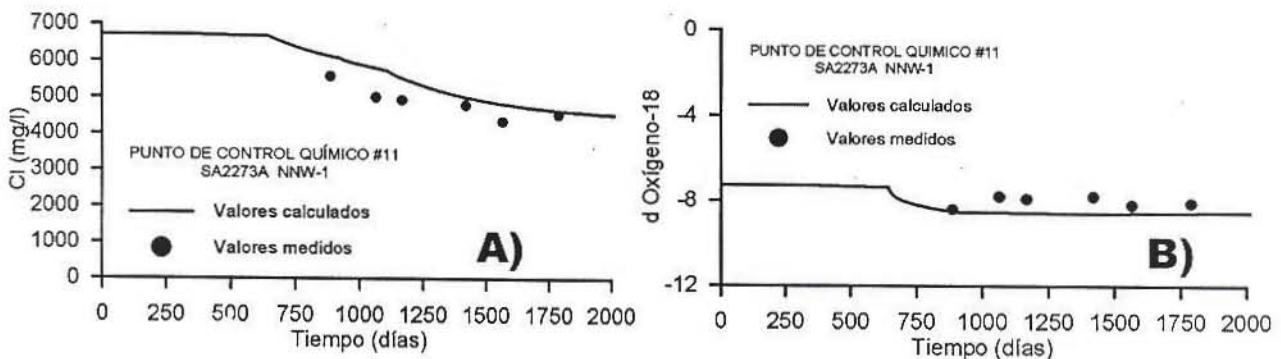


Figura 10. Comparación entre los valores medidos y calculados de A) cloruros y B) $\delta^{18}O$ en un sondeo corto perforado en un punto del túnel situado a 2300 m de la entrada.

concentraciones de especies químicas conservativas en 3 de los 45 puntos de control utilizados en la calibración del modelo numérico.

METODOLOGÍA PARA EL ANÁLISIS DE LA COHERENCIA ENTRE LOS MODELOS HIDRODINÁMICO E HIDROQUÍMICO

El sistema hidrogeológico de la isla de Äspö ha estado afectado por diferentes eventos pre y post-glaciares durante el Cuaternario. De entre todos estos eventos se supone que la última glaciación (Weichsel), junto con el levantamiento isostático asociado posteriormente, son los responsables más directos de la situación hidroquí-

mica actual del entorno de la isla. Ese último evento glaciario alcanzó su máximo hace 20000-18000 años aproximadamente. Desde entonces hasta el presente, en el entorno de la isla de Äspö han imperado diversos escenarios paleogeográficos. Tras la deglaciación, la isla de Äspö quedó sumergida bajo un lago de agua dulce conocido como el Lago Glaciar Báltico que posteriormente fue reemplazado por diferentes episodios de aguas salinas y dulces correspondientes a diversos ciclos transgresivo-regresivos (Laaksoharju y Wallin, 1997). El afloramiento subaéreo de la isla de Äspö, tal como existe en la actualidad, se supone tuvo lugar hace aproximadamente 2000 años. Esta compleja secuencia de eventos paleoclimáticos y paleogeográficos dio lugar a la infil-

tración de aguas con diferente composición hidroquímica e isotópica. Las interacciones de estas aguas con las rocas del zócalo junto con las mezclas de los diferentes tipos de aguas determinaron las condiciones hidroquímicas actuales.

Los modelos de mezcla tienen una componente subjetiva asociada a la identificación y definición de las aguas extremas, especialmente cuando algunas de ellas corresponden a aguas relictas o fósiles (como es el agua glaciár de Äspö). Por otra parte, los resultados de los modelos hidrodinámicos contienen también incertidumbres asociadas a incertidumbres en los parámetros del modelo y a hipótesis simplificadoras sobre los procesos de flujo y las condiciones iniciales y de contorno.

Los dos tipos de modelos presentados anteriormente comparten entre sí el objetivo común de

evaluar el impacto producido por la construcción del túnel del laboratorio subterráneo sobre la hidroquímica de la isla de Äspö. Si ambos modelos son capaces de alcanzar sus objetivos, cada uno con un enfoque diferente y con información independiente, sus resultados deberían ser coherentes. Sin embargo, la comparación entre ambos modelos no es intuitiva, ni puede ser realizada directamente.

Tomando como base el modelo M3 realizado por Laaksoharju (1999) y resumido anteriormente (Figuras 3 y 4), se realizó un nuevo modelo de mezcla definiendo 4 aguas extremas en lugar de 5. Se decidió prescindir del "agua marina alterada" y calcular de nuevo los porcentajes de mezcla en base a las 4 aguas de referencia aparentemente más relevantes: glaciár, báltica, meteórica y salmuera (Figura 11). Una vez redefinido el modelo de mezcla se calcularon los por-

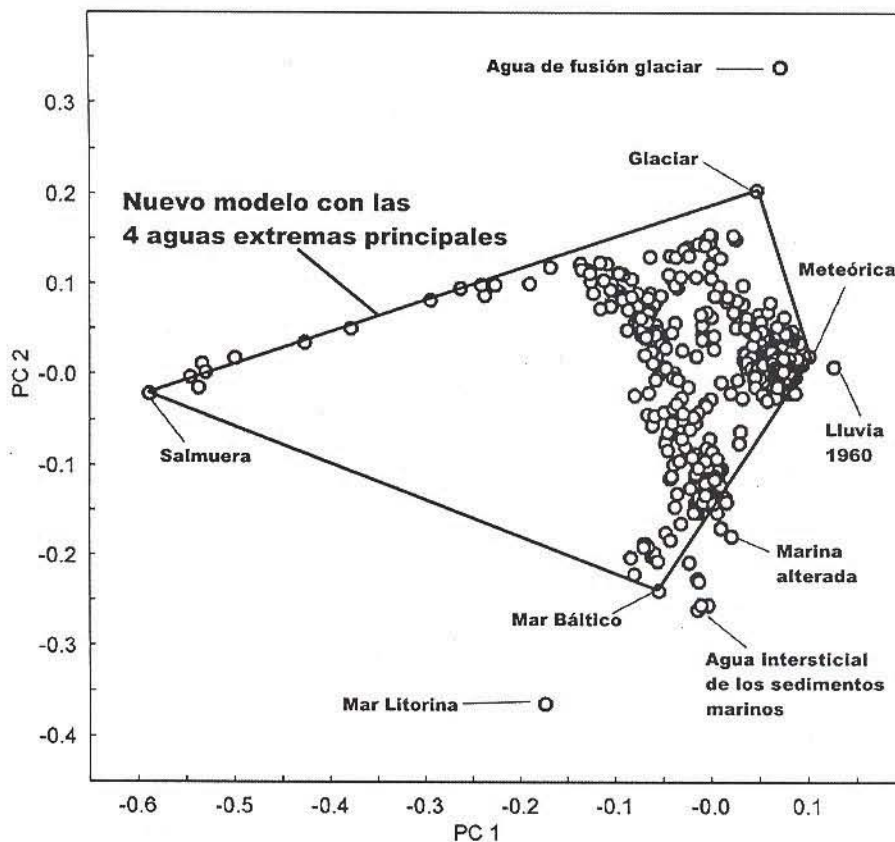


Figura 11. Nuevo modelo hidroquímico de mezcla definido en función de las 4 aguas extremas de referencia más importantes: Glaciár, Báltica, Meteórica y Salmuera.

centajes de mezcla en cada una las muestras de agua recogidas en los puntos de control utilizados en el modelo hidrodinámico. De esta forma se obtuvieron los datos de la evolución temporal de los porcentajes de mezcla en aquellos puntos donde se cuenta con la evolución temporal (medida) de las especies químicas disueltas.

Puesto que la mezcla de aguas es el resultado de los procesos de flujo y transporte de solutos, las fracciones de mezcla pueden ser analizadas cualitativa y cuantitativamente como si fuesen trazadores ficticios de carácter conservativo. La distribución espacial y temporal de cada fracción de mezcla se puede simular resolviendo una ecuación de transporte con sus correspondientes condiciones iniciales y de contorno. Las condiciones iniciales se generaron por interpolación de la información disponible antes de la construcción del túnel, de forma análoga a como se generaron las condiciones iniciales de las especies químicas disueltas.

Finalmente, para evaluar de manera cuantitativa

la coherencia entre los modelos hidrodinámico e hidroquímico se resolvió el modelo numérico hidrodinámico con los porcentajes de mezcla. Las evoluciones de los porcentajes de mezcla calculadas con el modelo numérico hidrodinámico fueron comparadas con las evoluciones de los porcentajes de mezcla calculadas con el modelo hidroquímico de mezcla, en todos los puntos de control definidos previamente.

DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS

En el análisis de la coherencia entre ambos modelos se asumen de manera inherente todas las suposiciones y simplificaciones adoptadas por cada uno de los dos modelos analizados. Es de destacar que los porcentajes de mezcla se comportan de manera conservativa durante el período simulado.

La Figura 12 muestra un ejemplo de los resultados obtenidos en el análisis de la coherencia entre los modelos hidrodinámico e hidroquímico.

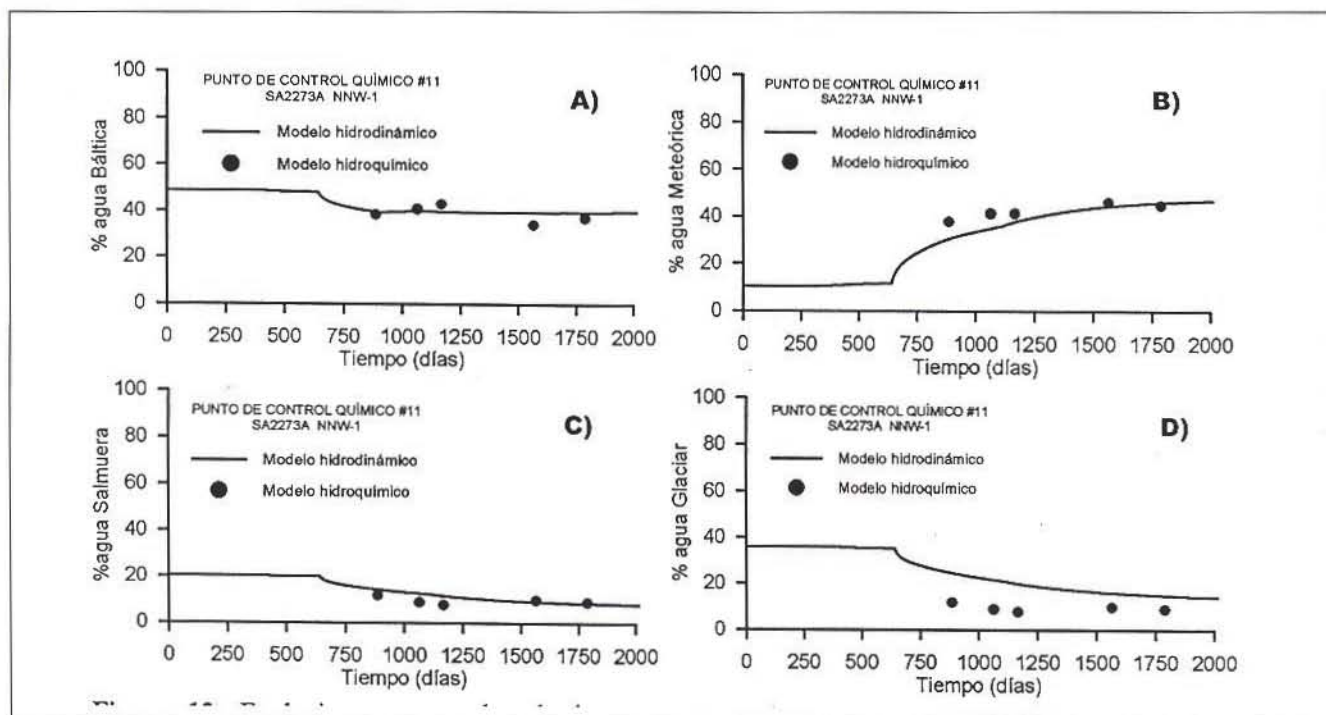


Figura 12. Evoluciones temporales de los porcentajes de mezcla calculados con los modelos hidrodinámico (línea) e hidroquímico (puntos) en el punto de control 11. A) porcentaje de agua del mar Báltico, B) porcentaje de agua meteorica, C) porcentaje de agua salmuera y D) porcentaje de agua glaciar.

En dicha figura se representan las evoluciones temporales de los porcentajes de mezcla calculados con ambos modelos en el mismo punto de control (número 11) utilizado anteriormente para mostrar los resultados del modelo hidrodinámico (Figura 12). En general, se observa que existe una excelente concordancia entre las evoluciones de los porcentajes de mezcla calculadas con ambos modelos. Hay que resaltar que la concordancia entre ambos modelos es tanto mayor cuanto mejor es el ajuste entre el modelo hidrodinámico y los valores medidos de concentraciones químicas conservativas (cloruros y ^{18}O). Las mayores

discrepancias en los porcentajes de mezcla calculados hidrodinámicamente se observan en los puntos de control en los que el modelo hidrodinámico no reproduce bien los datos de cloruros. Como era de esperar, los resultados del ajuste para los porcentajes de mezcla no son mejores que los obtenidos para las especies conservativas disueltas, lo cual carecería de sentido dentro de la metodología adoptada.

Las Figuras 13 y 14 resumen gráficamente la coherencia global entre los dos modelos. La Figura 13 muestra los valores calculados de los

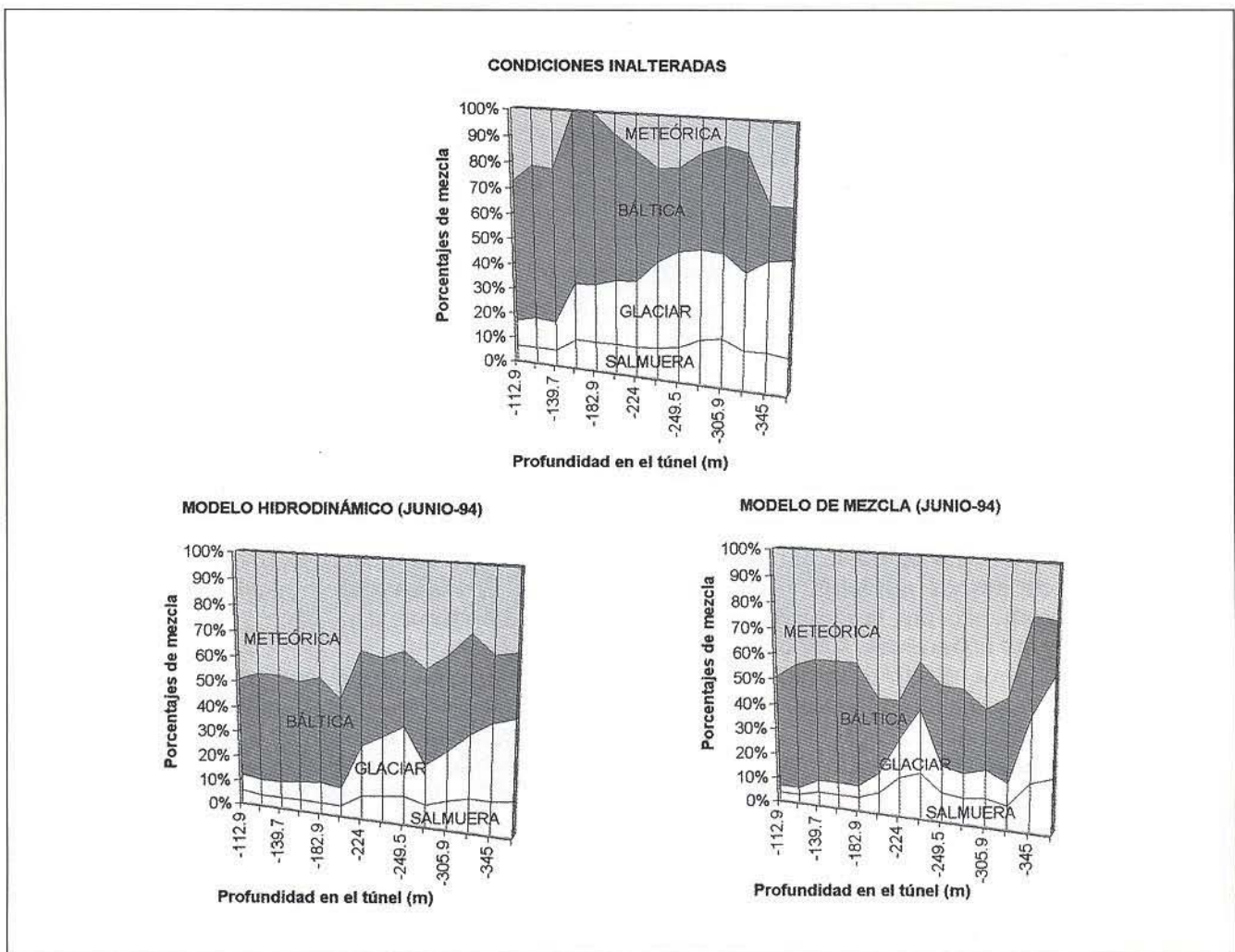


Figura 13. Comparación entre los resultados del modelo hidrodinámico (izquierda) e hidroquímico (derecha) a lo largo del túnel. El impacto de la construcción del túnel se puede evaluar por comparación con las condiciones inalteradas (parte superior). Los resultados calculados corresponden a junio de 1994.

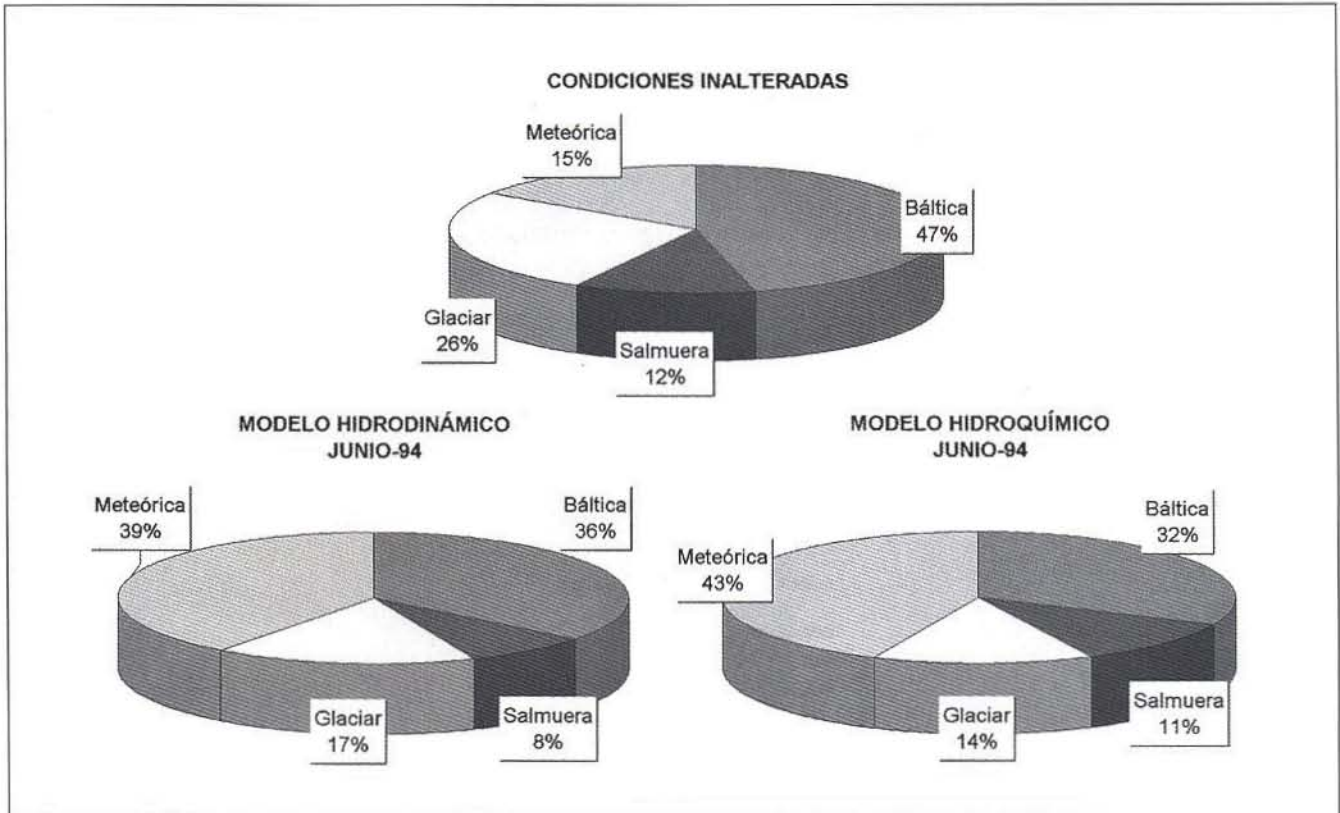


Figura 14. Valores medios de los porcentajes de mezcla calculados a lo largo del túnel. Comparación entre los resultados de los modelos hidrodinámico (izquierda) e hidroquímico (derecha) calculados para junio de 1994.

porcentajes de mezcla en 14 puntos de control a lo largo del túnel. En esta figura se aprecia cómo los resultados de ambos modelos del impacto hidroquímico producido por la construcción del túnel son altamente coherentes. Ambos modelos predicen un incremento importante de agua meteórica en el entorno del túnel, la cual reemplaza fundamentalmente a las componentes glaciar y báltica inicialmente mayoritarias. Los dos modelos predicen, para la misma fecha, un máximo de agua meteórica a 200 m de profundidad y dos máximos de agua glaciar a profundidades de 230 y 365 m. Las discrepancias cuantitativas entre ambos modelos son totalmente asumibles dentro de los márgenes de precisión de ambos modelos. Laaksoharju (1999) evaluó la precisión del modelo M3 de Äspö alrededor de un +/- 10% en los porcentajes de mezcla. Por otra

parte, el error cometido al realizar la interpolación de estos porcentajes para generar las condiciones iniciales del modelo hidrodinámico se estima en torno al +/- 8%.

La evaluación global del impacto hidroquímico producido por la construcción del túnel se muestra en la Figura 14. Los valores medios de los porcentajes de mezcla de las aguas infiltradas a lo largo de todo el túnel indican que, tras la construcción del mismo, la influencia de agua dulce pasa de un 15% inicial a un 40% en junio de 1994, asociado al descenso de las influencias glaciares y bálticas, mientras que la influencia de las salmueras profundas no varía demasiado. En la Figura 14 es posible apreciar de nuevo el elevado grado de coherencia detectado entre los modelos hidrodinámico e hidroquímico.

CONCLUSIONES Y APLICACIONES METODOLÓGICAS

El modelo de mezcla M3 permite realizar un tratamiento óptimo de la gran cantidad de información hidroquímica disponible para la isla de Äspö. La combinación de las herramientas estadísticas multivariantes junto con el conocimiento hidroquímico permite formular hipótesis (corroboradas cuantitativamente) sobre el origen de las aguas subterráneas del sistema. El modelo M3 ayuda a explicar "el **porqué**" las muestras de agua recogidas en Äspö son como son, desde un punto de vista de su origen. Sin embargo, puesto que no se incorporan implícitamente los procesos físicos del sistema, dicho modelo es incapaz de explicar "qué" es lo que sucede y "cómo" sucede. Además, el modelo M3 no contiene ningún tipo de restricción temporal y, por lo tanto, es un modelo sin capacidad predictiva.

Estas limitaciones del modelo de mezcla de aguas se pueden soslayar con el modelo numérico de flujo y transporte, que se basa en los procesos hidrodinámicos que gobiernan el sistema. Con el modelo hidrodinámico es posible comprender "qué" es lo que sucede (alteración hidrológica de un sistema) y "cómo" sucede (transporte de masa asociado a dicha alteración hidrológica), e incluso predecir "cuándo" sucederá. Sin embargo, el modelo hidrodinámico es una representación de un modelo conceptual previo de carácter cualitativo, el cual es incapaz de explicar por sí solo los aspectos relativos al origen de las aguas subterráneas de la isla Äspö.

El modelo de mezcla de aguas se construye usando herramientas estadísticas y utilizando información hidroquímica e isotópica. La elección de las aguas extremas contiene una elevada componente subjetiva. Por otra parte, el modelo numérico de flujo y transporte se construye a partir de un modelo conceptual que incluye la geometría, condiciones iniciales y de contorno, así como un gran número de parámetros, muchos de los cuales fueron deducidos a partir de un proceso de calibración. En el presente trabajo se ha mostrado que los resultados de ambos modelos son globalmente coherentes entre sí. Este hecho puede ser considerado como un ejercicio de validación exitoso para ambos modelos. Este ejercicio de validación confirma la hipótesis

de que las aguas subterráneas de Äspö son, fundamentalmente, el resultado de la mezcla de diversas aguas durante los últimos 20000 años. Por otra parte, el modelo numérico hidrodinámico ha sido validado de nuevo, mostrándose capaz de reproducir las evoluciones de los porcentajes de mezcla con la misma precisión que las especies conservativas, sin necesidad de calibraciones adicionales.

El ejercicio realizado muestra el potencial metodológico de la utilización conjunta de modelos numéricos hidrodinámicos y modelos hidroquímicos de mezcla. Por una parte, los modelos de mezcla realizados con herramientas estadísticas multivariantes pueden aportar modelos conceptuales basados en un tratamiento cuantitativo de la información química disponible. Dichos modelos conceptuales pueden ser posteriormente incluidos en modelos numéricos de flujo y transporte de solutos para simular hidrodinámicamente el comportamiento del sistema. De esta forma los modelos numéricos pueden, además de corroborar o excluir diferentes hipótesis, aportar capacidad predictiva a los resultados obtenidos con los modelos hidroquímicos de mezcla. La incorporación de los porcentajes de mezcla dentro de los modelos numéricos de flujo permite estudiar cuantitativamente las variaciones producidas en las diferentes facies hidroquímicas cuando se alteran las condiciones hidrogeológicas.

La utilización conjunta de los enfoques hidrodinámico e hidroquímico constituye una potente herramienta para el estudio y posterior gestión de sistemas hidrogeológicos complejos como se ha demostrado en el caso de la isla de Äspö. La metodología propuesta es aplicable a cualquier sistema hidrogeológico afectado por la mezcla de diferentes tipos de aguas extremas. La aplicación de esta metodología requiere disponer de suficientes datos hidrogeológicos de la zona como para construir un modelo de flujo y transporte, así como una base de datos hidroquímicos e isotópicos estadísticamente representativa.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo se ha realizado en el marco de proyectos de investigación financiados por la

Empresa Nacional de Residuos Radiactivos (ENRESA) dentro del Convenio Marco con la Universidad de A Coruña y la Fundación de la Ingeniería Civil de Galicia: Proyectos FEBEX (código 703231) y de Validación de Códigos (código 703334). También se ha contado con financiación del proyecto de investigación de la CICYT HID98-282. Se agradece al Ministerio de Educación y Ciencia la concesión de una beca de investigación al primer autor. El acceso y utilización de los datos del Laboratorio Subterráneo de Äspö ha sido posible gracias al acuerdo de colaboración suscrito entre ENRESA y su homóloga sueca, SKB. Queremos dar las gracias a todas las personas involucradas en el Laboratorio Subterráneo de Äspö por las facilidades prestadas para la adquisición de datos, así como por sus comentarios y sugerencias, especialmente a M. Laaksoharju por haber compartido generosamente los resultados del modelo M3 de Äspö. Los autores también agradecen a E. Custodio y X. Sánchez-Vila sus comentarios y sugerencias realizados en la fase de revisión del manuscrito de este artículo.

REFERENCIAS

- Álvarez, C.; Anguita, F.; Cuena, J.; Custodio, E.; López, L. y Sahuquillo, A. (1983): "Modelos en hidrología subterránea". En: *Hidrología Subterránea*, volumen II, cap. 16, 1573-1664. Custodio, E. y Llamas, M.R. (Eds.). Editorial Omega. Barcelona.
- Andersson, M.P. y Woessner, W.W. (1992): "Applied Groundwater Modeling". Academic Press, Inc. San Diego. 381 pp.
- Berkowitz, B. (1994): "Modelling flow and contaminant transport in fractured media". *Advances in Porous Media*. Chapter 6, 397-451. M.Y. (Corapcioglu, I. Ed.). Elsevier
- Carrera, J. (1987): "State of the art of the inverse problem applied to the flow and solute transport equations". En: *Analytical and numerical groundwater flow and quality modeling*, NATO-ARW Ser. C: Mathematical and physical sciences, vol. 224. (Custodio, E. y Gurgui, A. Eds.), 549-583. D. Reidel, Norwell Mass.
- Carrera, J. y Samper, F.J. (1989): "Hydrological modeling for the safety assessment of radioactive waste disposal". *Actas del Symposium "Safety Assessment of Radioactive Waste Repositories"*. París. OCDE. 481-500.
- Custodio, E. (1983): "Relaciones agua dulce-agua salada en las regiones costeras". En: *Hidrología Subterránea*, Vol II, Cap 13, 1315-1385. Custodio, E. y Llamas, M.R. (Eds.). Editorial Omega. Barcelona.
- Darcy, H. (1856): "Les fontaines publiques de la Ville de Dijon". V. Dalmont. Paris. 674 pp.
- ENRESA (1991): "Revisión de modelos numéricos relacionados con el almacenamiento de residuos radiactivos". *Publicación Técnica* 1/91. 177 pp.
- Galarza, G.; Medina, A y Carrera, J. (1994): "Manual del código TRANSIN III". Dpto. de Ingeniería del Terreno. E.T.S.E.C.C.P.B. Universidad Politécnica de Cataluña. Barcelona.
- Gautschi, A.; Vomvoris, S. y Zuidema, P. (1998): "The role of groundwater flow modelling in performance assessment". In: *Workshop Proceedings- Borgholm, Suecia*, 1-3 septiembre de 1997. Nuclear Energy Agency. Paris. 35-43.
- Grenthe, I. y Puigdomenech, I. (1997): "Introduction". En: *Modeling in aquatic chemistry*. Chapter 1, 1-33 (Grenthe, I. y Puigdomenech, I. Eds.). OECD-Nuclear Energy Agency. Paris.
- Hautojärvi, A.; Koskinen, L y Löfman, J. (1994): "Hydraulic modelling of the Large Scale Redox Experiment at Äspö HRL". En: *Hydraulic modelling and tracer tests on the Redox Experiment in the Äspö Hard Rock Laboratory Tunnel*. E. Gustafsson (Ed). Informe Técnico de Progreso SKB PR-25-94-37. Estocolmo.
- IAEA (1982): "Radioactive Waste Management Glossary". International Atomic Energy Agency. IAEA_TECDOC-264. Vienna.
- Juanes, R. (1997): "Un código para la modelización tridimensional de flujo y transporte". Proyecto Técnico, E.T.S. de Ingenieros de Caminos, Canales y Puertos. Universidad de A Coruña. A Coruña. 250 pp.
- Juanes, R. y Samper, F.J. (2000): "Una formulación general y eficiente de fracturas y condiciones de contorno en el M.E.F.: I. Aspectos teóricos". Aceptado y pendiente de publicación en *Revista Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería*.
- Laaksoharju, M. (1999): "Groundwater characterisation and modelling: problems, facts and possibilities". Tesis doctoral. Department of Civil and Environmental Engineering. Royal Institute of Technology (KTH). Estocolmo. 164 pp.
- 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*. Informe de Cooperación Internacional de SKB ICR 97-04. Estocolmo.
- Laaksoharju, M.; Skarman, C y Skarman, E. (1999 a): "Multivariate, mixing and mass balance (M3) calculations, a new tool for decoding hydrogeochemical information". *Applied Geochemistry*, 14, 861-871.
- Laaksoharju, M.; Tullborg, E.-L.; Wikberg, P.; Wallin, B. y Smellie, J. (1999 b): "Hydrogeochemical conditions and evolution at the Äspö HRL, Sweden". *Applied Geochemistry*, 14, 835-859.
- McDonald, M.G. y Harbaugh, A.W. (1988): "A Modular Three-Dimensional Finite-Difference Ground Water Flow Model".

U.S. Geological Survey Techniques of Water Resources Investigations, book 6. 586 pp.

Medina, A. y Carrera, J. (1996): "Coupled estimation of flow and solute transport parameters". *Water Resources Research*, 32, 3063-3076.

Molinero, J.; Samper, F.J. y Juanes, R. (2000 a): "Filtración hacia túneles: simulación dinámica del avance de la excavación". *Revista de Obras Públicas*, nº 3397, 33-49.

Molinero, J.; Samper, F.J. y Juanes, R. (2000 b): "Three dimensional numerical models of groundwater flow and solute transport in fractured granites: Impact of tunnel construction in the groundwater system of the Äspö island (Sweden). In: *Groundwater: Past Achievements and Future Challenges*. XXX Congreso de la Asociación Internacional de Hidrogeólogos. Ciudad del Cabo. Sudáfrica. En prensa.

Moreno, L.; Tsang, Y.W.; Tsang, C.F.; Hale, F.V. y Neretnieks, I. (1988): "Flow and tracer transport in a single fracture: A stochastic model and its relation to some field observations". *Water Resources Research*, 24 (12), 2033-2048

NEA (1989): "Use of Hydrogeochemical Information in Testing Groundwater Flow Models". *Workshop Proceedings-Borgholm, Suecia*, 1-3 septiembre de 1997. Nuclear Energy Agency. París. 366 pp.

Oreskes, N.; Shrader-Frechette, K. y Belitz, K. (1994): "Verification, validation and confirmation of numerical models in earth sciences". *Science*, Vol 263, 641-646.

Rhén, I.; Bäckbom, G.; Gustafson, G.; Stanfors, R. y Wikberg, P. (1997 b): "Results from pre-investigations and detailed site characterization". Informe Técnico SKB TR 97-03.

Rhén, I.; Gustafson, G.; Stanfors, R. y Wikberg, P. (1997 a): "Models based on site characterization" 1986-1995. Informe Técnico SKB TR 97-06.

Rhén, I.; Bäckbom, G.; Gustafson, G.; Stanfors, R. y Wikberg, P. (1997 b): "Results from pre-investigations and detailed site characterization". Informe Técnico SKB TR 97-03.

Samper, F.J. (1986): "Statistical Characterization of Hydrochemical, Isotopic and Hydrological Data from Aquifers". Tesis doctoral. Dept. of Hydrology and Water Resources. University of Arizona. Tucson. Arizona.

Samper, F.J. y Neuman, S.P. (1987): "Análisis cuantitativo de la estructura estadístico-espacial de los datos hidroquímicos

e isotópicos de las aguas subterráneas". VII Conferencia sobre Hidrología General y Aplicada, 203-212. Zaragoza.

Samper, F.J. (1993): "Calibración y validación de modelos de flujo y transporte de masa en acuíferos". II Congreso de Métodos Numéricos en Ingeniería (Navarrina, F. y Casteleiro, M. Eds.). Sociedad Española de Métodos Numéricos en Ingeniería. Vol I, CIMNE, Barcelona. 461-470.

Samper, F.J. (1994): "Modelos de acuíferos". En: *Temas actuales de hidrología subterránea*. Universidad Nacional de Mar del Plata, Argentina. 79-101.

Samper, F.J.; Delgado, J.; Juncosa, R. y Molinero, J. (1997): "Thermo-Hydro-Geochemical Modeling of the Mock-up FEBEX Experiment". Informe Técnico del proyecto FEBEX 70-ULC-M-02. Universidad de A Coruña. A Coruña.

Samper, F.J.; Juncosa, R.; Delgado, R. y Montenegro, L. (1998): "CORE-LE-2D: A Code for Water Flow and Reactive Solute Transport. Users Manual". Dpto. de Tecnología de la Construcción. E.T.S.I.C.C.P. Universidad de A Coruña. A Coruña.

Samper, F.J.; Delgado, J.; Montenegro, L. y Molinero, J. (1999): "Modelos numéricos para la gestión de la calidad y contaminación de las aguas subterráneas: estado del arte y ejemplos". En: *La contaminación de las aguas subterráneas: un problema pendiente* (Samper, J.; Sahuquillo, A.; Capilla, J.E. y Gómez Hernández, J.J. Eds.), 576-583. Instituto Tecnológico y Geominero de España. Madrid.

Smellie, J. y Laaksoharju, M. (1992): "The Äspö Hard Rock Laboratory: final evaluation of the hydrochemical preinvestigations in relation to existing geological and hydraulic conditions". SKB Informe técnico TR 92-31. Estocolmo.

Smellie, J.A.T.; Laaksoharju, M. y Wikberg, P. (1995): "Äspö, SE Sweden: a natural groundwater flow model derived from hydrochemical observations". *Journal of Hydrology*, 172, 147-169.

Stanfors, R.; Rhén, I.; Tullborg, E.-L. y Wikberg, P. (1999): "Overview of geological and hydrogeological conditions of the Äspö hard rock laboratory site". *Applied Geochemistry*, 14, 819-834.

Zheng, C. (1990): "MT3D: A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems". Report to the U.S. Environmental Protection Agency, Ada, OK. 170 pp.