

MODELACIÓN DE LAS AGUAS NATURALES

JOEL FAGUNDO SIERRA, J.R. FAGUNDO CASTILLO, P. GONZÁLEZ

HERNÁNDEZ, M. SUÁREZ MUÑOZ

Centro Nacional de Termalismo “Víctor Santamarina” (MINSAP)

RESUMEN

Se presenta el sistema informático MODELAGUA, desarrollado para la modelación de los procesos geoquímicos que originan la composición química de las aguas naturales, se compara con otros sistemas comerciales y se explica el algoritmo de los principales cálculos que realiza. Como ejemplos de aplicación se muestran los resultados obtenidos en la determinación del origen de la composición química de las aguas presentes en acuíferos de diferente naturaleza hidrogeológica, desarrollados en sedimentos carbonatados y no carbonatados de la Sierra del Rosario.

Palabras claves: modelos hidrogeoquímicos, balance de masas.

ABSTRACT

MODELAGUA, software developed for modeling the hydrogeochemical processes, which originate the chemical composition of the natural waters, is shown and it is compared with other commercial systems. The algorithm with the main calculations is also discussed. The results of its application in the determination of the water chemical composition origin which occur at different hydrogeological nature aquifers developed at carbonate and no carbonate sediments of Sierra del Rosario is shown.

Key words: hydrogeochemical models, mass balance.

INTRODUCCIÓN

Las redes de control de la calidad del agua, que existen en muchos países, así como las parcelas y cuencas experimentales que se instalan en amplios intervalos de tiempo, generan un volumen tal de datos que para su procesamiento es necesario la existencia de sistemas computarizados rápidos y eficaces. (Fagundo y Alvarez, 1997).

Entre los paquetes de programa de tipo hidrogeoquímico se encuentran NETPATH, PHREEQE y BALANCE. El NETPATH y el PHREEQE realizan cálculos químico-físicos como la distribución de las distintas especies en solución, las concentraciones molales y actividades de los iones y los estados de equilibrios respecto a las fases sólidas. Además permiten calcular diferentes tipos de reacciones químicas en diferentes condiciones como son mezcla de dos disoluciones y evolución de las reacciones al añadir un número determinado de elementos químicos.

El programa BALANCE por su parte, se basa solamente en el modelo de balance de masas y calcula la cantidad de cada fase sólida que entra o sale de la disolución a lo largo de una línea de flujo, necesaria para justificar los cambios químicos observados entre los dos puntos. Permite además abordar problemas de mezcla y de reacciones redox. (Scientific Software Group, 1998).

La principal limitación de estos sistemas es que al estar implementados en FORTRAN, exigen una entrada en un formato muy estricto y no permiten la utilización de bases de datos estándar.

En este trabajo se describe el sistema MODELAGUA que al igual que el BALANCE se basa en el modelo de balance de masas pero presenta la ventaja de estar soportado sobre Windows, lo que le proporciona mayor flexibilidad de entrada de datos y mayor facilidad de operación. El programa incorpora también modelos de mezcla de aguas y de reconocimiento de patrones.

Por último se presenta el resultado de la aplicación del programa al estudio de sistemas hidrogeoquímicos de características diferentes como son los acuíferos carbonatados y los acuíferos no carbonatados de la Sierra del Rosario.

MATERIALES Y MÉTODOS

Para la realización de este trabajo se seleccionaron muestras de la Sierra del Rosario correspondientes a un estudio de exploración detallado realizado por Peláez et al (1993) y a muestreos más recientes efectuados por González et al (2000).

Las mediciones de los parámetros geoquímicos se realizaron en el campo, mediante pHmetro y medidor de temperatura y potencial redox. Los contenidos de CO_2 y H_2S , así como la alcalinidad total ($\text{HCO}_3^- + \text{CO}_3^{2-}$) fueron también determinados en el campo, mientras que los restantes macroconstituyentes (Cl^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+} , Na^+ , K^+ y Mg^{2+}) se analizaron en el laboratorio antes de las 24 horas de tomadas las muestras. Las marchas analíticas se efectuaron mediante las técnicas analíticas estándar (APHA, AWWA, WPCF, 1992).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El programa Modelagua fue desarrollado en Borland Delphi 4 sobre Windows (figura 1). Su objetivo fundamental es comparar la composición química de una muestra de estudio, con una o dos muestras de referencias para llegar a la determinación de los procesos químicos que dieron lugar a su composición mediante cálculo de balance de masas o análisis de mezcla.

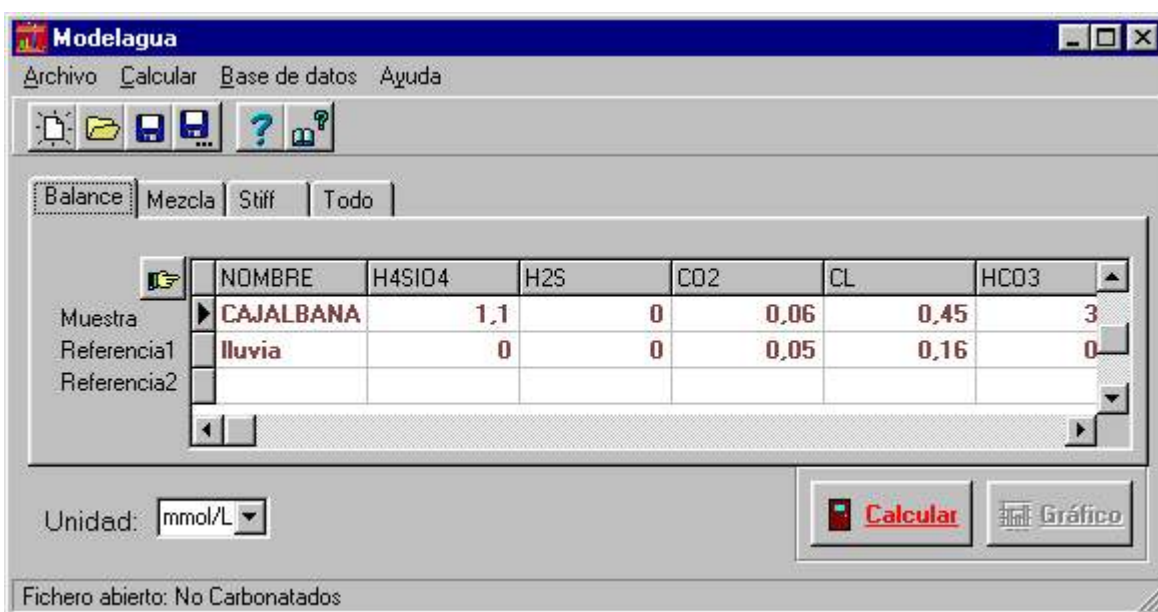


Figura 1) Ventana principal del programa MODELAGUA.

Si dos aguas se encuentran conectadas en una misma línea de flujo, se debe esperar que ambas posean la misma composición química, de no ser así resulta claro que durante la trayectoria de la primera muestra hasta la segunda, han ocurrido procesos químicos que modificaron su composición. Esta diferencia de composición o delta iónico puede entonces ser utilizada para la determinación de los procesos químicos que tienen lugar en la región (figura 2).

$$C_i = C_i(\text{final}) - F * C_i(\text{inicial}) \quad (\text{I})$$

- $C_i(\text{final})$: Concentración del compuesto i en la solución final.
- $C_i(\text{inicial})$: Concentración del compuesto i en la solución inicial.
- F: Factor de concentración por evapotranspiración.
- C_i : Delta iónico.

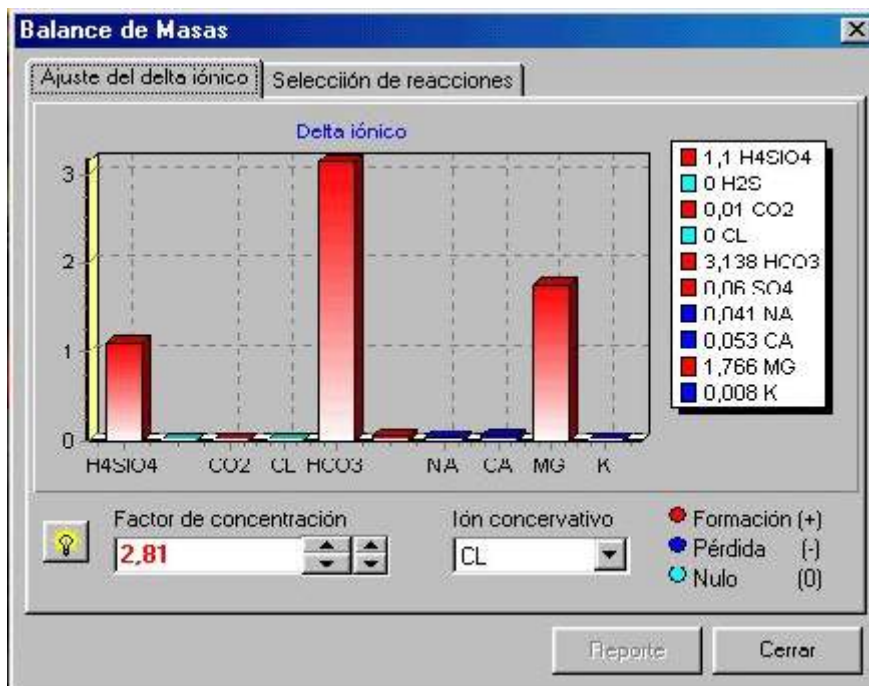


Figura 2) Ventana de ajuste del delta iónico del programa MODELAGUA.

En el caso que la solución final se deba a la mezcla de dos soluciones A y B, el delta iónico será la diferencia entre la composición final de la muestra y el promedio de la composición de las soluciones iniciales. (Pascual, 1990).

$$C_i = C_i(\text{final}) - [x(Ca_i) + (1 - x)(Cb_i)] \quad (\text{II})$$

- x: Tanto por uno de mezcla para el componente A
- (1-x): Tanto por uno de mezcla para el componente B

El primer paso en el cálculo es la determinación del factor de concentración o el factor de mezcla según el caso. Para esto es necesario la selección de un ion conservativo (q), es decir, un ion que no participe en ningún proceso, por lo que para ese ion debe cumplirse $C_q=0$, sustituyendo y despejando en (I) se tiene:

$$F = C_q(\text{final}) / C_q(\text{inicial}) \quad \text{(III)}$$

De este modo (ec. III) el programa calcula F según el ion conservativo que se seleccione y sustituyendo en (I) calcula el delta iónico para el resto de los iones. Para el caso de mezclas el procedimiento es el mismo, calculándose el factor de mezcla (x) al sustituir y despejar $C_q=0$ en la ecuación (II).

Una vez conocido el valor del delta iónico se puede efectuar el balance de masas (figura 3) para la determinación de los procesos químicos presentes. El cálculo del balance de masas se realiza mediante la solución de un sistema de ecuaciones lineales de la forma (Appelo y Postma, 1993):

$$C_i = \sum_k a_k * b_{ik} \quad \text{(IV)}$$

- a_k : Masa transferida en cada proceso k (valor a calcular).
- b_{ik} : Coeficiente estequiométrico de cada componente i en cada reacción k.



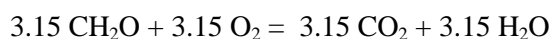
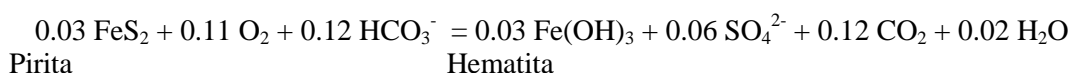
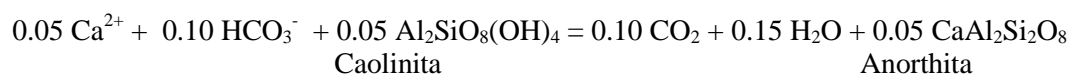
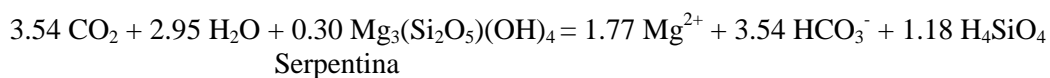
Figura 3) Ventana de selección de los procesos químicas a modelar y cálculo de la masa transferida en cada una.

Finalmente se obtiene un reporte con los procesos geoquímicos que da origen a la composición de la muestra estudiada y la cantidad de material transformado por cada uno (tabla 1).

Tabla 1) Balance de masas y procesos geoquímicos producidos por extracción de las lluvias en sedimentos no carbonatados (ultrabásicas) de la Sierra del Rosario. Concentraciones en mmol/l.

DATOS:	H4SiO4	H2S	CO2	CL	HCO3	SO4	NA	CA	MG	K
Cajálbana	1,10	0,00	0,06	0,45	3,70	0,06	0,55	0,06	1,85	0,02
lluvia	0,00	0,00	0,05	0,16	0,20	0,00	0,21	0,04	0,03	0,01
Factor de concentración: 2,81										
DELTA IONICO:	1,10	0,00	0,01	0,00	3,14	0,06	-0,04	-0,05	1,77	0,01
PROCESOS:										
Serpentina (Dis.)	1,18	0,00	-3,54	0,00	3,54	0,00	0,00	0,00	1,77	0,00
Caolinita-Albita	-0,08	0,00	0,04	0,00	-0,04	0,00	-0,04	0,00	0,00	0,00
Caolinita-Anorthita	0,00	0,00	0,10	0,00	-0,10	0,00	0,00	-0,05	0,00	0,00
Pirita - Hemetita	0,00	0,00	0,12	0,00	-0,12	0,06	0,00	0,00	0,00	0,00
CO2 (biogénico)	0,00	0,00	3,15	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
CO2 - HCO3	0,00	0,00	0,14	0,00	-0,14	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
TOTAL:	1,10	0,00	0,01	0,00	3,14	0,06	-0,04	-0,05	1,77	0,00
ERROR:	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01

Procesos geoquímicos:



El programa Modelagua se aplicó al estudio de sedimentos carbonatados y no carbonatados de la Sierra del Rosario determinándose los procesos geoquímicos que originan la composición de sus aguas y la proporción en que cada uno de los minerales es transformado en los diferentes acuíferos presentes en estas zonas.

La región de la Sierra del Rosario se caracteriza por la cantidad y diversidad de sus aguas, lo cual se debe a las complejas condiciones geológicas e hidrológicas existentes, como consecuencia del desplazamiento y transporte tectónico de rocas de diferente naturaleza, así como la presencia de numerosas fallas orientadas en diferentes direcciones. Por sus características litológicas se pueden distinguir entre acuíferos carbonatados, formados fundamentalmente por calizas, y acuíferos no carbonatados, constituidos por aluminosilicatos de tipos ácidos (aleurolitas, argilitas, areniscas y silicatos), básicos (serpentinitas, harzburgitas y otras rocas serpentinizadas) y ultrabásicos (Fagundo et al, 1993).

En los acuíferos carbonatados de la Sierra del Rosario se determinaron procesos de disolución congruente de calcita, dolomita y halita, disolución incongruente de albita y microclino, procesos de redox que implican oxidación de pirita y reducción parcial de sulfatos, así como procesos de generación biogénica de CO₂ y de precipitación de sílice, especialmente en la zona más profunda.

En la región no carbonatada se determinaron procesos de disolución de halita y serpentina, disolución incongruente de plagioclasas (albita, microclino y anorthita), oxidación de pirita, reducción de sulfatos y generación de CO₂.

En ambos tipos de acuíferos los procesos ocurren con mayor intensidad, por lo general, en las zonas más profundas, como resultado del aumento de la presión de CO₂, así como de una mayor temperatura producto del calentamiento geotérmico.

Estos resultados fueron validados con criterios químico-físicos mediante la confección de diagramas de estabilidad, determinación de índices de saturación y análisis del estado redox mediante gráficos pH-Eh. (Fagundo-Sierra, 2000)

Tabla 3) Procesos geoquímicos en acuíferos carbonatados.

Proceso		Zona no saturada	Zona saturada	Zona de saturación y circulación profunda	Total
Calcita (D)	CaCO ₃	188 (16 %)	94 (8 %)	896 (76 %)	1178
Dolomita (D)	CaMg(CO ₃) ₂	19 (6 %)	49 (16 %)	244 (76 %)	311
Halita (D/P)	NaCl	0 (0 %)	36 (100 %)	0 (0 %)	36
Albita (D/P)	NaAlSi ₃ O ₈	66 (4 %)	0 (0 %)	1483 (96 %)	1548
Pirita (O)	FeS ₂	23 (2 %)	49 (4 %)	1093 (94 %)	1165
Formación de H ₂ S (R)	H ₂ S	0 (0 %)	17 (70 %)	7 (30 %)	24
Microclino (D)	KAlSi ₃ O ₈	0 (0 %)	0 (0 %)	19 (100 %)	19
Cuarzo (P)	SiO ₂	0 (0 %)	0 (0 %)	702 (100 %)	702
Dióxido de carbono (G/E)	CO ₂	87 (58 %)	63 (42 %)	-792 (-100 %)	

Tabla 4) Procesos geoquímicos en acuíferos no carbonatados

Proceso		Acuíferos en rocas ultrabásicas		Acuíferos en rocas ácidas		Total
		Somero	Profundo	Somero	Profundo	
Halita (D)	NaCl	0 (0 %)	15 (100 %)	0 (0 %)	212 (100%)	227
Serpentina (D)	Mg ₃ (Si ₂ O ₅)(OH) ₄	131 (87 %)	16 (11 %)	11 (18 %)	50 (82 %)	208
Albita (D/P)	NaAlSi ₃ O ₈	0 (0 %)	1153 (100 %)	815 (33 %)	1596 (66 %)	3564
Microclino (D)	KAlSi ₃ O ₈	0 (0 %)	39 (100 %)	25 (23 %)	83 (77 %)	147
Anorthita (D/P)	CaAl ₂ Si ₂ O ₈	0 (0 %)	1390 (100 %)	22 (13 %)	147 (87 %)	1559
Pirita (O)	FeS ₂	26 (41%)	375 (59 %)	22 (2 %)	925 (98 %)	1348
Sulfato (R)	H ₂ S	0 (0 %)	426 (100 %)	0 (0 %)	120 (100 %)	546
Cuarzo (P)	SiO ₂	0 (0 %)	559 (100 %)	-400 (32 %)	845 (68 %)	1004
Dióxido de carbono (G/E)	CO ₂	140 (69 %)	-63 (100 %)	119 (11 %)	148 (89 %)	218

D: disolución

P: precipitación

O: oxidación

R: reducción

Concentraciones en mg/l (%)

G: generación

E: escape

CONCLUSIONES

1. Se desarrolló un nuevo sistema informático (MODELAGUA) para la modelación de los procesos geoquímicos que originan la composición química de las aguas naturales. En el mismo se integran modelos de balance de masas, análisis de mezcla de aguas y reconocimiento de patrones hidrogeoquímicos.
2. Se demostró la aplicabilidad del programa MODELAGUA a través del estudio de sistemas hidrogeoquímicos de características diferentes como son los acuíferos carbonatados y los acuíferos no carbonatados.
3. Se determinaron los procesos geoquímicos que originan la composición química de las aguas de los acuíferos carbonatados y no carbonatados de la Sierra del Rosario, así como la proporción de minerales transformados por la acción de los mismos.

BIBLIOGRAFÍA

1. APHA–AWWA–WPCF (1992). “Métodos Normalizados para el análisis de Aguas Potables y Aguas Residuales”, Am. Public Assoc., Edición 17th. Editorial Grijalbo (Madrid), 4.1–4.235.
2. Appelo C. A. J. and D. Postma (1993). “Geochemistry, Groundwater and Pollution”. Ed. Balkema, Rotterdam, Netherlands, 536 Págs.
3. Fagundo, J.R. y E. Alvarez (1997). “Modelos geoestadísticos y geoquímicos para el tratamiento de datos hidroquímicos”. En: Curso Avanzado sobre Contaminación de Aguas Subterráneas. Muestreo, evolución, recuperación. M. Arellano, J.R. Fagundo (directores). Ed. Universidad Jaume I, Castellón (España), Volumen 1, 1.167–1.78.

4. Fagundo, J.R., J. Rodríguez , J.M. Pajón, E. Franco, G. Benítez, A.C., J. Guerón e I. Abelló (1993). “Caracterización hidroquímica de las aguas del Pan de Guajaibón y otras áreas cársicas cercanas en la Sierra del Rosario”. En: “Taller Internacional sobre Cuencas Experimentales en el Karst. Libro de Comunicaciones”. H.J. Llanos, I. Antigüedad, I. Morales, A. Eraso (editores). Ed. Universidad Jaume I, Castellón (España), 43-53.
5. Fagundo-Sierra, J. (2000). “Modelo para la determinación del origen de la composición química de las aguas naturales”. Tesis de Diploma Universitario, Facultad de Química, Universidad de la Habana, Págs.
6. González, P., M. Suárez, G. Benítez, J. Ramírez y J.R. Fagundo (2000). “Caracterización de aguas minerales de algunos yacimientos del país”. El Mundo del Termalismo, OMTh. En proceso de edición.
7. Pascual, J.M. (1990). “Procesos hidrogeoquímicos en aguas subterráneas. Bases teóricas (Cap. III)”. En: “Hidroquímica del macizo de Garraf: análisis de los procesos relacionados con la mezcla de aguas subterráneas, dulces y saladas en el litoral Coufofell–Bellouse (Tarragona)”. Tesis Doctoral, 241 Págs.
8. Peláez, R., Ma. de la C. Olivárez, R. Núñez y M. Valdivia (1990). “Informe para la búsqueda detallada, exploración orientativa de las aguas minero–medicinales de San Diego–Bermejales”.
9. Scientific Software Group (1998). “Ground Water, Geology, and other Enviromental Models and Modeling Software”. <http://www.scisoftware.com>.