



UNIVERSIDAD DE CHILE

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS

DEPARTAMENTO DE GEOLOGÍA

**ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE PROCESOS DE CONTAMINACIÓN EN ACUÍFEROS
COSTEROS MEDIANTE MODELOS DE TRANSPORTE REACTIVO**

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE GEÓLOGA

JASMÍN NATALIA PALAVECINO PARADA

PROFESOR GUÍA:
DRA. LINDA DANIELE

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
DR. CRISTÓBAL GIRARDI LAVIN
DRA. CLAUDIA CANNATELLI

SANTIAGO DE CHILE
2019

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA
OPTAR AL TÍTULO DE: Geóloga
POR: Jasmín Natalia Palavecino Parada
FECHA: Julio, 2019
PROFESOR GUÍA: Linda Daniele

ANÁLISIS Y SIMULACIÓN DE PROCESOS DE CONTAMINACIÓN EN ACUÍFEROS COSTEROS MEDIANTE MODELOS DE TRANSPORTE REACTIVO

Chile es un país con una extensa área de costa la cual ha tenido un desarrollo urbanístico que no necesariamente considera la creciente demanda de recursos hídricos lo cual puede llevar a una sobrexplotación, induciendo problemas de contaminación como lo es la intrusión marina. Dado que las aguas subterráneas de las zonas costeras han sido poco estudiadas no existen muchas referencias con respecto a los procesos de intrusión marina y el posible deterioro de la calidad de las aguas. En este último punto es particularmente sensible el tema de la zona central de Chile, donde las zonas costeras son densamente habitadas y se ve el asentamiento de industrias.

Con el propósito de analizar la influencia de contaminantes inorgánicos (agua marina) y orgánicos (grupo BTEX) en un acuífero costero detrítico se procesaron datos mediante diferentes escenarios de funcionamiento usando el código PHREEQC y, al incorporar el factor tiempo, se implementaron modelos de transporte reactivo usando el programa CrunchFlow.

Al usar datos de agua de mar estándar y de un acuífero costero tipo con una configuración en parte confinada, donde existen pozos que bombean las dos capas acuíferas se evidencia que la intrusión marina se presenta en pozos cercanos a la costa y alcanza valores de hasta 1,7% del total de la composición del agua. Se identifica una relación entre el tipo de agua y la cercanía de la muestra a la costa. Además, se reconoce la existencia de procesos de intercambio iónico y precipitación/disolución de minerales.

El modelo de transporte reactivo con ingreso de contaminantes orgánicos en un acuífero costero salinizado evidencia que el ingreso del agua contaminada por BTEX provoca un aumento en el volumen de yeso, disminuyendo la porosidad en aquellas zonas de precipitación y aumentando en zonas donde se ve disolución de este mineral. Existe un descenso de pH asociado a la entrada del contaminante orgánico (descendiendo en casi una unidad) y un aumento mínimo asociado a la entrada de la intrusión marina. El factor que afecta de mayor manera la propagación y concentraciones máximas alcanzadas por las especies primarias en el sistema es la temperatura. También tiene un efecto en el volumen de mineral precipitado/disuelto en el sistema. Otros parámetros que afectan el sistema son la porosidad inicial, el pH y la geología de la zona.

Los resultados obtenidos confirman que los procesos de interacción agua-roca, además de la interacción con contaminantes orgánicos, son factores fundamentales en la composición del agua subterránea.

*Maximilien Dante Palavecino Machuca
Llegaste en el momento preciso, llegaste y
llenaste todo del más puro amor que puede
existir...*

Tabla de contenido

1. Introducción.....	1
1.1 Formulación del problema	1
1.2 Objetivos.....	2
1.2.1 Objetivo General	2
1.2.2 Objetivos específicos	2
1.3 Hipótesis de trabajo	3
1.4 Metodología	3
2. Marco teórico.....	7
2.1 Intrusión marina en acuíferos costeros.....	7
2.2 Contaminación en acuíferos costeros.....	8
2.2.1 Comportamiento del grupo BTEX en un acuífero.....	9
2.2.2 Factores que influyen la presencia y movimiento del BTEX en un acuífero costero	11
2.3 Caracterización de un acuífero costero detrítico.....	11
2.4 Geología inferida para los acuíferos costeros en Chile	13
3. Construcción de modelos de transporte reactivo	14
3.1 Simulación de la intrusión marina	15
3.1.1 Definición de parámetros	15
3.1.2 Escenario implementado.....	16
3.2 Escenario de contaminación por BTEX en acuífero costero salinizado.....	17
3.2.1 Definición de parámetros	17
3.2.2 Escenario implementado.....	18
4. Resultados y discusiones.....	20

4.1 Hidrogeoquímica.....	20
4.1.1 Esquema de los pozos	20
4.1.2 Composición química del agua subterránea	21
4.1.3 Cálculo del factor salino	24
4.1.4 Delta iónico	26
4.1.5 Índices de saturación	28
4.2 Evolución del modelo de transporte reactivo de intrusión marina.....	30
4.2.1 Evolución en la geoquímica de las aguas	30
4.2.2 Evolución de los minerales en la simulación	38
4.2.3 Porosidad y pH.....	41
4.3 Evolución del modelo de transporte reactivo de contaminantes orgánicos en un acuífero salinizado.....	44
4.3.1 Evolución en la geoquímica de las aguas	44
4.3.2 Evolución de los minerales en la simulación	54
4.3.3 Porosidad y pH.....	57
4.4 Discusión	60
4.4.1 Temperatura inicial.....	62
4.4.2 pH de la intrusión	65
4.4.3 Configuración espacial.....	66
5. Conclusiones.....	68
6. Bibliografía	70
7. Anexo	74

Índice de figuras

Figura 1.1 Salinización en un acuífero costero. Fuente: Estelles, 2012.	1
Figura 1.2 Distribución espacial los pozos en el acuífero tipo. Fuente: elaboración propia.	4
Figura 1.3 Principales ecuaciones utilizadas por el software CrunchFlow. Fuente: Steefel et al., 2005.....	6
Figura 1.4 Esquema simplificado del funcionamiento de CrunchFlow. Fuente: elaboración propia.	7
Figura 2.1 Hidrocarburos como fase inmisible separa en contacto con agua. Fuente: Celis, 2008.	9
Figura 2.2 Dispersión de hidrocarburos a partir de una fuga. Fuente: Celis, 2008.....	10
Figura 2.3 Migración del LNAPL en presencia de capas poco permeables. Fuente: Celis, 2008.	10
Figura 2.4 Ejemplo de la distribución espacial de conductividades hidráulicas presentes en un acuífero detrítico mixto. Se pueden ver las distintas variaciones de magnitud. Fuente: Zheng y Jiao, 1998.	12
Figura 2.5 Esquema de flujo en un acuífero costero con intrusión marina. Se puede ver que las extracciones de los pozos son una mezcla de agua marina y agua subterránea proveniente del continente. Fuente: Bocanegra y Custodio, 1994.	13
Figura 3.1 Modelo conceptual y esquema base para los modelos de transporte reactivo. Fuente: elaboración propia.....	14
Figura 3.2 Esquema de la configuración de variables en la simulación de intrusión marina. Caso porosidad inicial 19%. Fuente: elaboración propia.....	17
Figura 3.3 Esquema de la configuración de variables en la simulación de contaminación. Caso porosidad inicial 19%. Fuente: elaboración propia.....	19
Figura 4.1 Distribución en planta de las muestras utilizadas. Fuente: elaboración propia.	20
Figura 4.2 Diagrama de Piper. Fuente: elaboración propia.....	21
Figura 4.3 Diagramas binarios de Cl ⁻ v/s elementos mayoritarios. Se representa la línea de mezcla teórica en cada diagrama. Fuente: elaboración propia.	23

Figura 4.4 Facto salino para cada muestra. Fuente: elaboración propia.....	26
Figura 4.5 Delta iónico por muestra para los distintos iones. Fuente: elaboración propia.	27
Figura 4.6 Índice de saturación de la halita para cada muestra con respecto a los IS calculados por una mezcla conservativa (línea negra continua). Fuente: elaboración propia.	29
Figura 4.7 Evolución de especies primarias: a) Cl ⁻ (12% porosidad inicial); b) Cl ⁻ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.	31
Figura 4.8 Evolución de especies primarias: a) Na ⁺ (12% porosidad inicial); b) Na ⁺ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.	32
Figura 4.9 Evolución de especies primarias: a) Mg ²⁺ (12% porosidad inicial); b) Mg ²⁺ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.	33
Figura 4.10 Evolución de especies primarias: a) Ca ²⁺ (12% porosidad inicial); b) Ca ²⁺ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.	34
Figura 4.11 Evolución de especies primarias: a) SO ₄ ²⁻ (12% porosidad inicial); b) SO ₄ ²⁻ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.....	35
Figura 4.12 Gráfico multi – elemento en la celda 240,200 para el caso de intrusión marina – 12% porosidad inicial. En la parte inferior se observa un zoom de la zona roja. Se observa, además, un esquema de la ubicación de la celda dentro del modelo. Fuente: elaboración propia.....	36
Figura 4.13 Gráfico multi – elemento en la celda 240,200 para el caso de intrusión marina – 19% porosidad inicial. En la parte inferior se observa un zoom de la zona roja. Fuente: elaboración propia.....	37
Figura 4.14 Evolución de mineralogía primaria: a) Calcita (12% porosidad inicial); b) Calcita (19% porosidad inicial). Se observa un zoom de una de las celdas con concentración máxima a los 60 años. Fuente: elaboración propia.	39
Figura 4.15 Evolución de mineralogía primaria: a) Yeso (12% porosidad inicial); b) Yeso (19% porosidad inicial). Se observa un zoom de una de las celdas con concentración máxima a los 60 años. Fuente: elaboración propia.	40
Figura 4.16 Evolución la porosidad: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial. Fuente: elaboración propia.....	42
Figura 4.17 Evolución del pH: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial. Fuente: elaboración propia.....	43

Figura 4.18 Evolución del ácido acético: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial. Fuente: elaboración propia.....	45
Figura 4.19 Evolución del benceno: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial. Fuente: elaboración propia.....	46
Figura 4.20 Evolución de especies primarias: a) Cl ⁻ (12% porosidad inicial); b) Cl ⁻ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.....	47
Figura 4.21 Evolución de especies primarias: a) Na ⁺ (12% porosidad inicial); b) Na ⁺ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.....	48
Figura 4.22 Evolución de especies primarias: a) Mg ²⁺ (12% porosidad inicial); b) Mg ²⁺ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.....	49
Figura 4.23 Evolución de especies primarias: a) Ca ²⁺ (12% porosidad inicial); b) Ca ²⁺ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.....	50
Figura 4.24 Evolución de especies primarias: a) SO ₄ ²⁻ (12% porosidad inicial); b) SO ₄ ²⁻ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.....	51
Figura 4.25 Gráfico multi – elemento en la celda 240,200 para el caso de contaminación orgánica en un acuífero costero salinizado – 12% porosidad inicial. En la parte inferior se observa un zoom de la zona roja. Se observa, además, un esquema de la ubicación de la celda dentro del modelo. Fuente: elaboración propia.....	52
Figura 4.26 Gráfico multi – elemento en la celda 240,200 para el caso de contaminación orgánica en un acuífero costero salinizado – 19% porosidad inicial. En la parte inferior se observa un zoom de la zona roja. Fuente: elaboración propia.....	53
Figura 4.27 Evolución de mineralogía primaria: a) Calcita (12% porosidad inicial); b) Calcita (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.....	55
Figura 4.28 Evolución de mineralogía primaria: a) Yeso (12% porosidad inicial); b) Yeso (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.....	56
Figura 4.29 Evolución de mineralogía primaria: feldespato potásico, escenario 12% de porosidad inicial. Fuente: Elaboración propia.....	57
Figura 4.30 Evolución del pH: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial. Fuente: elaboración propia.....	58
Figura 4.31 Evolución la porosidad: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial.	59
Figura 4.32 Variación de la configuración espacial del modelo de intrusión marina. Fuente: Elaboración propia.	61

Figura 4.33 Variación del patrón para el SO_4^{2-} a los 60 años de simulación. Caso: a) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 20°C; b) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 30°C. Fuente: elaboración propia.....63

Figura 4.34 Variación del patrón para la calcita a los 60 años de simulación. Caso: a) modelo de intrusión marina a los 60 años con temperatura inicial 20°C; b) modelo intrusión marina a los 60 años con temperatura inicial 30°C. Fuente: elaboración propia.64

Figura 4.35 Variación del patrón para la calcita a los 60 años de simulación. Caso: a) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 20°C; b) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 30°C. Fuente: elaboración propia.....64

Figura 4.36 Variación del patrón para el pH a los 60 años de simulación. Caso: a) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 20°C; b) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 30°C. Fuente: elaboración propia.65

Figura 4.37 Modelo de intrusión marina, porosidad inicial 12%. Variación del patrón para el pH a los 60 años de simulación. A la derecha caso con variación de pH. Modelo de intrusión marina. Fuente: elaboración propia.66

Índice de tablas

Tabla 2.1 Propiedades fisicoquímicas del grupo BTEX. Fuente: Mitra and Roy, 2011. ...9	9
Tabla 3.1. Volumen y minerales utilizados en la simulación en CrunchFlow para el caso de intrusión marina. Fuente: Elaboración propia. 15	15
Tabla 3.2. Composición química del agua inicial presente en el acuífero y del agua de mar utilizada en el escenario de intrusión marina. Fuente: Elaboración propia. 16	16
Tabla 3.3. Composición química utilizada en el escenario de contaminación. Fuente: elaboración propia. 18	18
Tabla 4.1 Tipo de agua por muestra y zona donde esta fue extraída. Fuente: elaboración propia. 22	22
Tabla 4.2 Factor salino calculado a partir de las concentraciones de Cl ⁻ por muestra. En rojo se muestra el ejemplar de agua de mar y la muestra representativa del agua de recarga. Fuente: elaboración propia. 25	25
Tabla 4.3 Valores de delta iónico para cada una de las muestras considerando los iones Mg ²⁺ , Ca ²⁺ , SO ₄ ²⁻ , Na ⁺ y K ⁺ . Fuente: elaboración propia. 27	27

1. Introducción

1.1 Formulación del problema

Algunos de los acuíferos más aprovechados son aquellos que se encuentran en zonas costeras dada su cercanía a lugares poblados y agrícolas. Alrededor de un 40% de la población mundial vive en estas zonas (Burke et al., 2001; IOC/UNESCO, IMO, FAO, UNDP, 2011) producto de actividades pesqueras, industriales, así como turísticas (De Andrés y Barragán, 2016). Como consecuencia de lo anterior, los acuíferos costeros son el tipo de acuífero más afectado por la intrusión marina y salinización de las aguas y, éstos son los problemas ambientales más preocupantes en áreas costeras alrededor del mundo (Ferguson y Gleeson, 2012; Werner et al., 2013; Colombani et al., 2016). Las aguas subterráneas constituyen una de las principales fuentes de agua dulce en zonas cercanas a la costa y el aumento de la demanda de agua dulce induce una sobreexplotación de estos recursos hídricos, es decir, que la extracción supera la capacidad de recarga del acuífero llevando a un deterioro de la cantidad y calidad del agua. La sobreexplotación, puede provocar un cambio en la interfase agua de mar – agua dulce, incrementando los efectos adversos producidos por la intrusión marina (Figura 1.1).

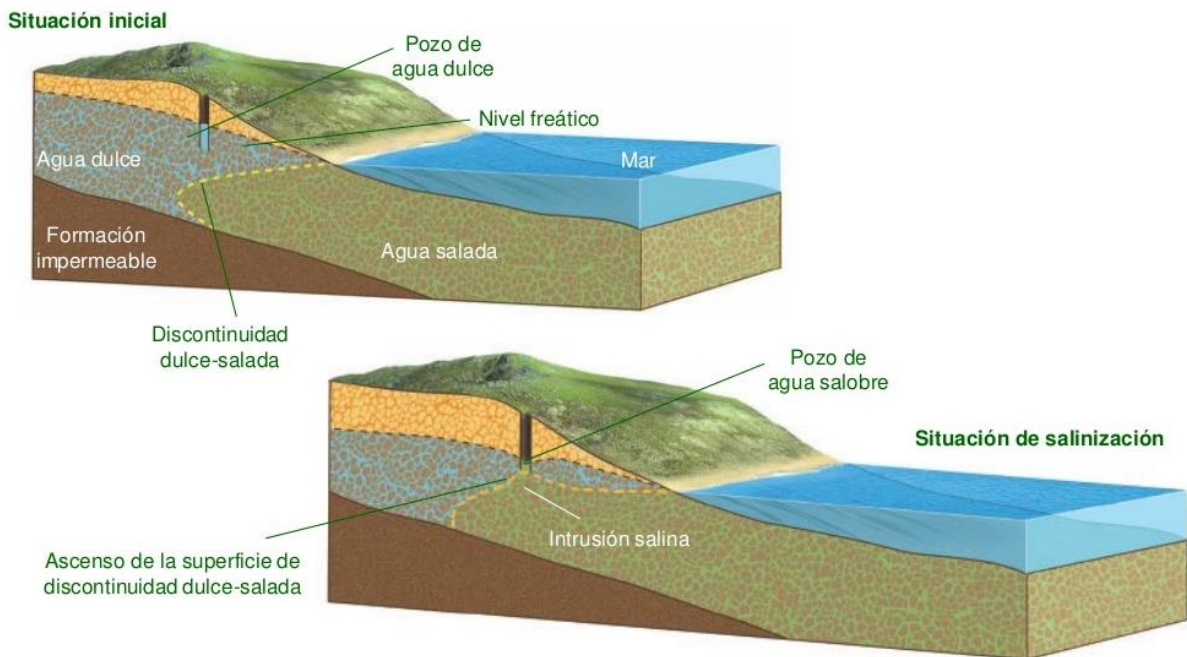


Figura 1.1 Salinización en un acuífero costero. Fuente: Estelles, 2012.

Las características geológicas, la fuerza del oleaje, las variaciones de marea y cambios en las precipitaciones pueden afectar el comportamiento hidrodinámico de un acuífero costero (Vallejos et al., 2014) condicionando el movimiento del agua subterránea y pudiendo tener incidencia en la dinámica de los eventuales procesos de contaminación presentes en este. Cabe destacar que la construcción y operación de obras civiles y

medios de transporte pueden inducir nuevas zonas de drenaje o, por el contrario, crear barreras en el flujo natural del agua subterránea hacia la costa lo que puede causar importantes cambios en los patrones de flujo de los acuíferos costeros (Custudio, 2009).

Existen varios tipos de acuíferos costeros, diferenciados por sus características geológicas. Los de mayor interés ecológico y económico son los acuíferos no consolidados, detríticos, constituidos por gravas y arenas de cauces, además de limos y arcillas. Estos poseen una extensión reducida y presentan porosidades variadas, llegando a exhibir zonas con una alta permeabilidad y porosidad que permite almacenar y transmitir agua con gran facilidad (Pendás, 1988). En Chile, particularmente, este tipo de acuífero es de suma importancia debido a la extensa área cubierta por dunas y paleodunas, las cuales ascienden a 131.000 hectáreas en la zona comprendida entre las provincias de Aconcagua y Chiloé (IREN N°4, 1966).

En Chile aún no se han realizado estudios de detalle acerca del impacto de la interacción agua dulce/agua marina, ni de como la hidrodinámica, entre otros factores, pueden condicionar una posible contaminación por las actividades antrópicas que se desarrollan en las áreas costeras. Sin embargo, el desarrollo socioeconómico de Chile y la nueva ocupación del litoral sugieren que es necesario profundizar en el conocimiento de estos acuíferos y, de los factores que condicionan su funcionamiento y su vulnerabilidad.

Tomando en cuenta lo anterior, esta memoria de Título realiza un análisis de un acuífero costero detrítico mediante simulaciones geoquímicas y modelos de transporte reactivo.

Se consideran diferentes escenarios que se utilizan como base para analizar la influencia de la geología y de las reacciones agua-roca en el comportamiento y la evolución de la calidad del agua dulce en zonas costeras. Esto permitirá mejorar el conocimiento de los procesos hidrogeoquímicos presentes en un acuífero con estas características y los cambios que ocurren como consecuencia del incremento del bombeo y de eventos de contaminación.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo General

Determinar el rol de los parámetros hidráulicos en las variaciones de la relación agua dulce/ agua marina y en los procesos de contaminación en un acuífero costero detrítico simulando diferentes procesos y eventos esquematizados en escenarios e implementados en modelos numéricos de transporte reactivo.

1.2.2 Objetivos específicos

Los objetivos específicos son:

- a) Generar un modelo conceptual de un acuífero detrítico heterogéneo que sea representativo de la zona central de Chile.

- b) Modelamiento y análisis de las variaciones agua dulce/ agua marina en el acuífero propuesto.
- c) Modelización de transporte reactivo en un escenario de intrusión marina.
- d) Modelización de transporte reactivo en escenario de presencia de contaminantes orgánicos en un acuífero salinizado.

1.3 Hipótesis de trabajo

Las áreas de mezcla de aguas son químicamente activas. Especialmente importante son los procesos fisicoquímicos que ocurren en los acuíferos costeros donde la presencia de agua de mar puede afectar la calidad de los recursos hídricos. La hipótesis es que el proceso de intrusión marina es función de la geología y que los procesos de interacción agua-roca pueden significar cambios importantes en la composición del agua subterránea y en los parámetros hidráulicos iniciales del acuífero. Adicionalmente se considera también eventuales procesos de contaminación.

1.4 Metodología

En el contexto de realización de esta memoria de título se realizan distintas actividades para el cumplimiento de los objetivos anteriormente planteados. Estas actividades contemplan de manera general, la búsqueda bibliográfica, el procesamiento de datos para la implementación del modelo conceptual, la implementación numérica del modelo conceptual, la construcción y análisis de los modelos de transporte reactivo.

A continuación, se describen los pasos realizados durante el desarrollo de esta investigación:

a) Construcción del modelo conceptual

Para proponer un escenario adecuado se realiza la búsqueda de antecedentes geológicos, hidrogeológicos e hidrogeoquímicos de los acuíferos costeros detríticos de Chile. La búsqueda de antecedentes comprende la intrusión marina, la salinización en acuíferos costeros y la contaminación por compuestos orgánicos ya que se quiere delinear un escenario complejo donde interactúan procesos naturales y antrópicos.

La búsqueda bibliográfica permite construir un acuífero costero tipo donde se representan en la vertical dos acuíferos, uno libre en superficie y otro semiconfinado a mayor profundidad. Para analizar el comportamiento de ambos, se consideran pozos abiertos en ambos niveles acuíferos con datos hidrogeoquímicos típicos de estas litologías. Se consideran así 4 pozos en la zona de acuífero libre y 9 pozos en la zona de acuífero semiconfinado (Figura 1.2) donde el pozo 01 y el 11 son los pozos más cercano y el más lejano, respectivamente. Se tiene, además, una muestra de agua de mar estándar. Todas las muestras utilizadas se consideran como válidas al haber cumplido con los protocolos QA/QC correspondientes.

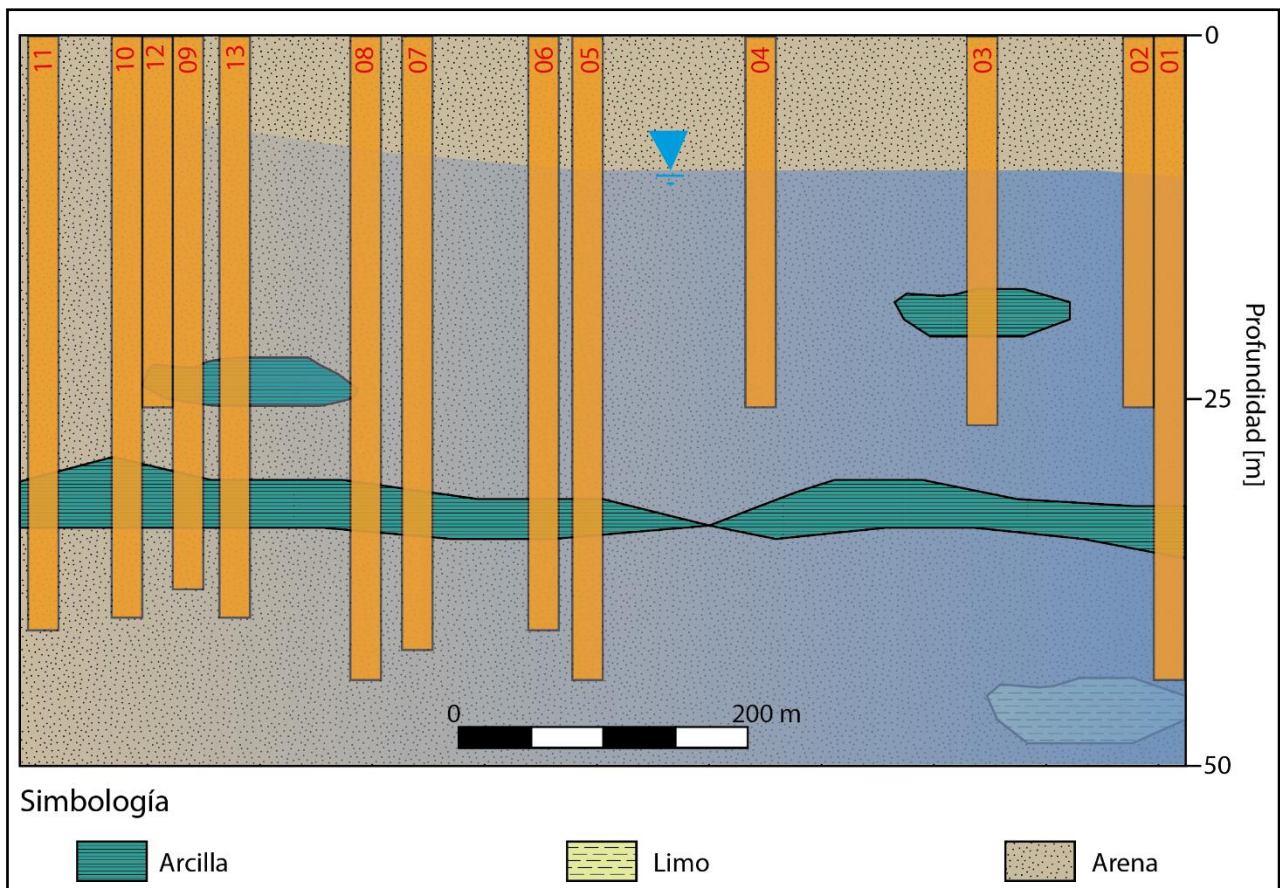


Figura 1.2 Distribución espacial los pozos en el acuífero tipo. Fuente: elaboración propia.

Para realizar un modelo simplificado y mostrar esquemática y espacialmente las muestras del acuífero costero tipo se utiliza el software SIG ArcMap (10.4.1) (ESRI, 2016) con el fin de poder ver las variaciones de los parámetros.

Se realizaron diagramas de Piper y binarios para la identificación del tipo de agua y los procesos mediante el software Diagrammes (6.59) (SIMLER, 2013).

b) Definición de la intrusión marina

Se calcula el factor salino y delta iónico con el fin de deducir el porcentaje de agua marina presente en el acuífero propuesto y dilucidar los procesos fisicoquímicos presentes en el sistema. El factor salino permite calcular el porcentaje teórico de mezcla con el agua de mar considerando como elemento conservativo el ion Cl^- , asumiendo que toda la concentración de este elemento proviene del agua de mar (Fernández, 2015 y referencias allí contenidas). La fórmula para el cálculo de este factor es la siguiente:

$$f_{sea} = \frac{(C_{Cl,sample} - C_{Cl,f})}{(C_{Cl,sea} - C_{Cl,f})} \times 100$$

Donde f_{sea} corresponde al factor salino, $C_{Cl,sample}$ es la concentración de Cl^- en el agua de cada pozo, $C_{Cl,f}$ es el contenido de Cl^- en una muestra representativa del agua de recarga y $C_{Cl, sea}$ es el contenido de Cl^- en una muestra de agua de mar de la zona.

El delta iónico permite comparar las concentraciones de los iones de interés presentes en las muestras con las concentraciones esperadas de una mezcla conservativa. Si el resultado es cercano a cero se considera una mezcla conservativa. Al contrario, si el resultado es positivo (o negativo) implica que existe un exceso (o déficit) de los iones y, por lo tanto, existe algún proceso modificador a la mezcla conservativa (Fidelibus et al, 1993). Este delta se calcula a partir del factor salino calculado anteriormente.

$$\Delta Ci = Ci,sample - Ci,mix$$

Donde ΔCi es la desviación del ion i , $C_{i, sample}$ es la concentración medida del ion i en la muestra y $C_{i, mix}$ es la concentración teórica del ion i en la mezcla conservativa de agua de mar y agua dulce (en meq/L). Además, $C_{i, mix}$ se calcula como sigue:

$$C_{i,mix} = f_{sea} * C_{i,sea} + (1 - f_{sea}) * C_{i,f}$$

Donde $C_{i, sea}$ es la concentración del ión en el agua de mar y $C_{i, f}$ es la concentración del ion en una muestra representativa del agua de recarga.

Se realiza un modelamiento geoquímico de la relación agua dulce/agua de mar mediante el código PHREEQC. Este software es capaz de modelar un transporte reactivo en 1 dirección calculando la especiación e índices de saturación, entre otras cosas (Parkhurst y Appelo, 1999).

c) Simulaciones y modelos de transporte reactivo

Se modela un flujo reactivo multicomponente mediante el código CrunchFlow con el fin de visualizar que cambios tienen lugar en un área predeterminada al pasar el flujo a través de los años. Los escenarios implementados consideran el ingreso de contaminantes orgánicos e intrusión marina.

CrunchFlow es utilizado en distintas áreas de las ciencias de la tierra incluyendo la hidrología, geoquímica, biogeoquímica, física del suelo y dinámica de fluidos ya que es capaz de realizar simulaciones hasta en 3 dimensiones de transporte reactivo en un medio poroso. El código considera los procesos físicos a través de la elección de condiciones de borde, selección de una grilla, especies primarias y secundarias presentes en el sistema y minerales que reaccionan. Además, otros parámetros como la temperatura, porosidad, contenido de gases, difusión, velocidad de flujo etc., pueden ser definidos en cada simulación (Steeffel, 2009). Dado que existe la presencia de acoplamiento de procesos en la naturaleza el programa considera distintas ecuaciones capaces de describir el transporte reactivo en medios porosos de forma correcta (Figura 1.3, Steeffel et al., 2005). Las principales fórmulas son las ecuaciones para la conservación de la energía, conservación de la masa, conservaciones de la masa del soluto, leyes constitutivas y conservación del momentum, este último utilizando Navier-

Stokes para un flujo a escala de poros, la Ley de Darcy para un flujo de medios porosos en la escala de continuidad y la ecuación de Cauchy para la deformación de la fase sólida.

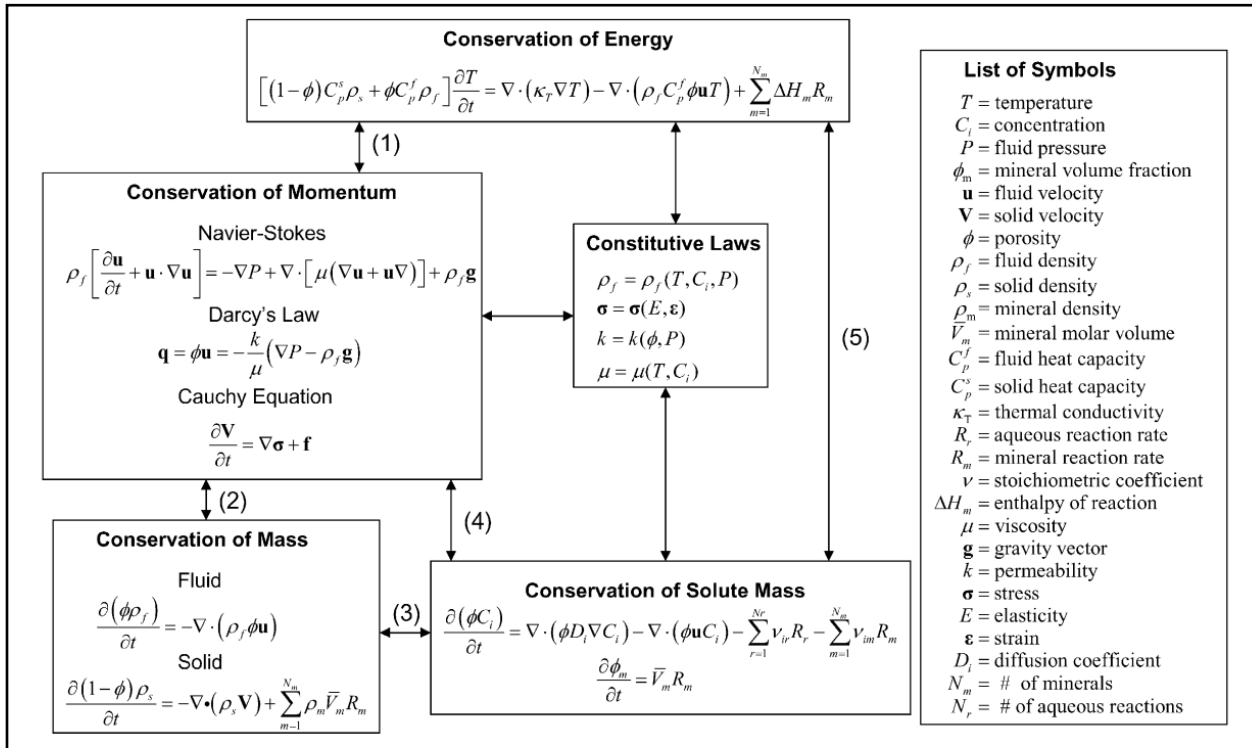


Figura 1.3 Principales ecuaciones utilizadas por el software CrunchFlow. Fuente: Steefel et al., 2005.

En la Figura 1.3, se muestra, además, flechas que señalan procesos importantes. Aquella con el número (1) se encuentra referida al acoplamiento entre la energía y el flujo del fluido a través de advección y el efecto de la temperatura en la densidad del flujo. La (2) representa el acoplamiento entre la conservación de momentum y la conservación de la masa para obtener la deformación de la fase sólida o el campo de flujo. La (3) es la conservación de la masa y sirve para calcular el efecto de la disolución o precipitación de minerales en las concentraciones de solutos y la masa de minerales. La (4) corresponde al acoplamiento entre el flujo del fluido y las concentraciones de soluto, mientras que, la (5) hace referencia al acoplamiento entre la conservación de energía y las concentraciones del soluto a través de los efectos de la temperatura en la termodinámica y las velocidades de reacción. Todo lo anterior representa un sistema complejo no lineal.

Un esquema simplificado del modelamiento se puede ver en la Figura 1.4, donde un flujo entra a cierta tasa en un área predeterminada por el usuario de $n \times n \text{ m}^2$, para cada metro cuadrado son calculados los parámetros y finalmente se obtiene un output con los datos para cada punto en un periodo de tiempo.

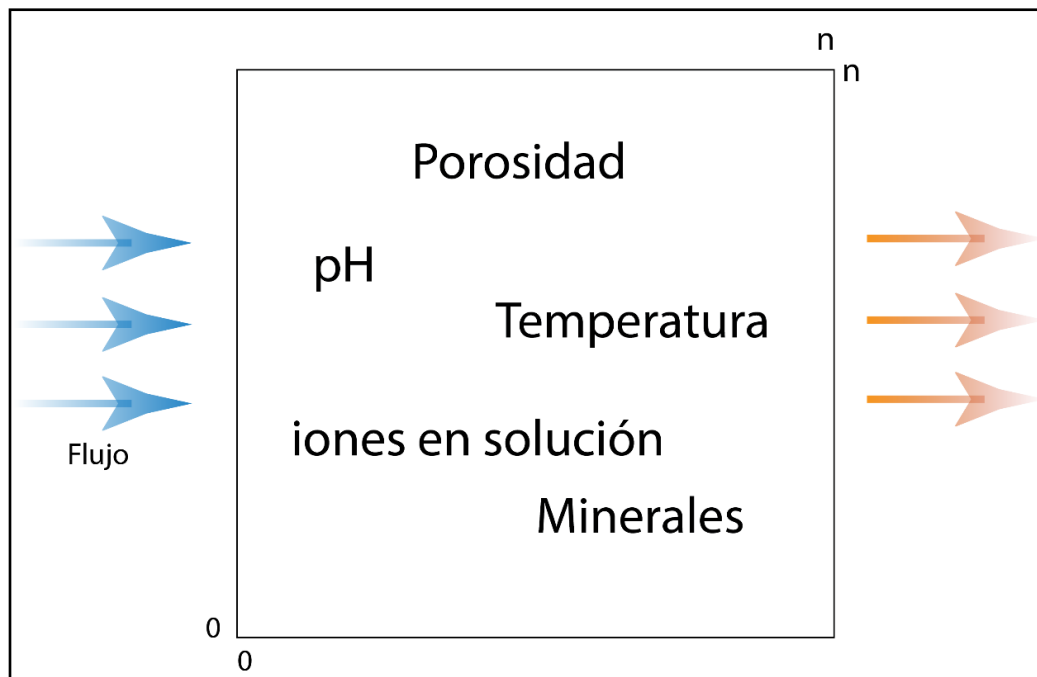


Figura 1.4 Esquema simplificado del funcionamiento de CrunchFlow. Fuente: elaboración propia.

2. Marco teórico

2.1 Intrusión marina en acuíferos costeros

La intrusión marina y salinización de las aguas ha sido estudiada extensamente en diversas investigaciones realizadas a través de los años y el mundo debido a que estos fenómenos se han convertido en uno de los mayores problemas de contaminación a nivel internacional en acuíferos costeros (Pulido-Leboeuf, 2004; Vallejos et al., 2017; Custodio, 2009; Daniele et al., 2013).

Muchos factores son los responsables de las variaciones en la interfase agua dulce – agua marina lo cual puede provocar un aumento en este problema, además, diversos procesos geoquímicos se encuentran actuando en la zona costera por lo que la composición resultante entre la mezcla de estas aguas puede ser muy distinta a la esperada teóricamente (Pulido-Leboeuf, 2004).

Uno de los factores principales al momento de aclarar el comportamiento de un acuífero y de como este se verá afectado por una intrusión marina es la geología ya que cada material presenta parámetros hidrogeológicos particulares. Por lo anterior, la disposición espacial de las litologías juega un rol importante, ya que, un acuífero compuesto solo por arena se verá distintamente afectado que uno compuesto por arena y lentes de limo y arcilla.

Otros factores que pueden afectar el ancho de esta interfaz son las fluctuaciones del nivel del acuífero, la oscilación de la marea, la frecuencia de las tormentas, entre otras

(Custodio y Llamas,1983). Respecto a la oscilación de la marea, este proceso es responsable del transporte de cierta cantidad de sal en el acuífero costero, de hecho, según estudios un acuífero influenciado por la marea se caracteriza no solo por una cuña de agua salina formada en la interfaz común de agua dulce – agua salada, sino que también presenta una pluma de solución salina superior (Robinson, 2006).

En el presente, existen muy pocos estudios referidos a los acuíferos costeros existentes en Chile, en efecto, no existe estudio alguno que tenga como objetivo esclarecer el impacto y dinámica de la intrusión salina en la costa nacional, así como tampoco alguno referido a la potencial contaminación antropogénica que se pueda presentar en un acuífero costero de carácter libre o semiconfinado.

2.2 Contaminación en acuíferos costeros

Como fue mencionado anteriormente, el agua subterránea se puede ver afectada por la salinización en las costas, sin embargo, este no es el único problema de contaminación que puede darse en estas aguas. Los compuestos orgánicos también pueden representar un gran problema de contaminación en el agua subterránea (Mitra y Roy, 2011), tal como lo son los productos derivados del petróleo.

El petróleo es una mezcla de compuestos orgánicos, principalmente formado por hidrocarburos insolubles en agua. Ejemplos de sus derivados son la gasolina, lubricantes, parafinas, entre otros. Estos contaminantes se encuentran en el agua subterránea como resultado de eliminación de efluentes industriales contaminados y eventos accidentales como derrames de petróleo y fugas en oleoductos (Fayemiwo et al., 2017).

Cuando la gasolina de alto octanaje entra en contacto con el agua subterránea cambia la composición de esta última debido a la fracción soluble en agua, donde, en un grado limitado, existe la mezcla de hidrocarburos con el agua. Los componentes predominantes en esta zona son los aromáticos siendo el benceno, tolueno, etilbenceno y xileno (BTEX) un 87,6% de los componentes totales disueltos (Saeed y Al-Mutairi, 1999).

En particular, los componentes de BTEX representan un alto riesgo para la salud, provocando efectos negativos en los seres humanos, entre las enfermedades causadas por estos componentes se encuentra el cáncer, lesiones hepáticas, irritación de órganos, problemas en el sistema nervioso central y en el sistema respiratorio (Mitra y Roy, 2011; Fayemiwo et al., 2017). Estos componentes pueden ingresar al organismo a través de la ingesta e inhalación.

En el grupo BTEX se encuentran compuestos de anillos mono-aromáticos con anillos de benceno de 6 carbonos como estructura central. Dada esta estructura cerrada se consideran especies no reactivas (especialmente el benceno), sin embargo, se sabe que estos compuestos son susceptibles a hidrogenación y a ciertas reacciones de sustitución (Fayemiwo et al., 2017). Como fue mencionado anteriormente, si bien tienen una naturaleza hidrofóbica, presentan la habilidad de disolverse en agua debido a bajo coeficiente de partición octanol – agua (K_{ow}) que favorece una disolución hidrofílica

(Fayemiwo et al., 2017). Un resumen de las propiedades fisicoquímicas de este grupo químico se presenta en la .

Tabla 2.1 Propiedades fisicoquímicas del grupo BTEX. Fuente: Mitra and Roy, 2011.

Parameters	Benzene	Toluene	Ethylbenzene	Xylenes
Formula	C_6H_6	$C_6H_5CH_3$	$C_6H_5CH_2CH_3$	$C_6H_4(CH_3)_2$
Molar weight	78.12	92.15	106.18	106.18
Density ($g\ mL^{-1}$)	0.8765	0.8669	0.8670	0.8685
Polarity	Non-polar	Non-polar	Non-polar	Non-polar
Solubility ($mg\ L^{-1}$)	1780	500	150	150
Soil-water partitioning coefficient	97	242	622	570
Henry's law constant ($25^\circ C$) $\{kPa \cdot m^3 / Mole\}$	0.55	0.67	0.70	0.80

Cabe destacar que los BTEX se encuentra entre los productos químicos más abundantes en el mundo, usándose como disolventes en los procesos industriales, así como en productos de uso doméstico como insecticidas y pinturas (Fayemiwo et al., 2017).

2.2.1 Comportamiento del grupo BTEX en un acuífero

Dependiendo de la densidad del hidrocarburo líquido en fase no acuosa (NAPL) este se localizará en la parte inferior (DNAPLs) o superior (LNAPLs) del acuífero. (Figura 2.1) (Celis, 2008). El grupo BTEX es considerado LNAPL.

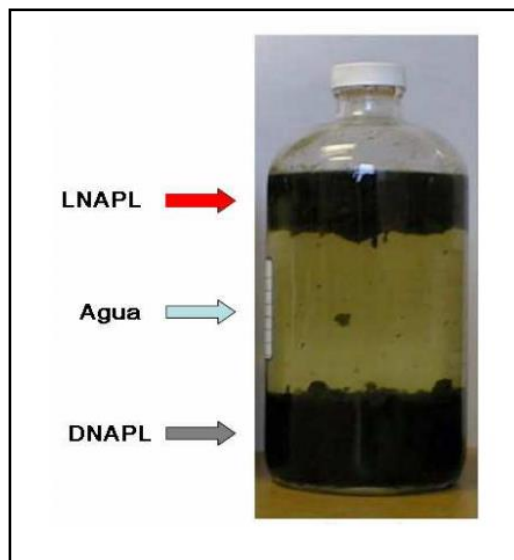


Figura 2.1 Hidrocarburos como fase inmisible separa en contacto con agua. Fuente: Celis, 2008.

Los LNAPL flotan sobre el nivel freático del acuífero y forman capas de espesores variables llegando a los metros (fracción llamada fase libre no acuosa). La velocidad a la que circula la fase libre es, por lo general, menor a la velocidad del flujo de agua subterránea. Al contrario, la fase soluble de los LNAPL forma una pluma en la parte superior de la zona saturada circulando a una velocidad mayor que la fase libre (Celis,

2008). Una vista esquemática de la distribución de hidrocarburos a partir de una fuga se puede ver en la Figura 2.2. Se aprecia que cuando el hidrocarburo llega a la napa de agua la propagación deja de ser predominantemente vertical, moviéndose horizontalmente en dirección del flujo de agua subterránea.

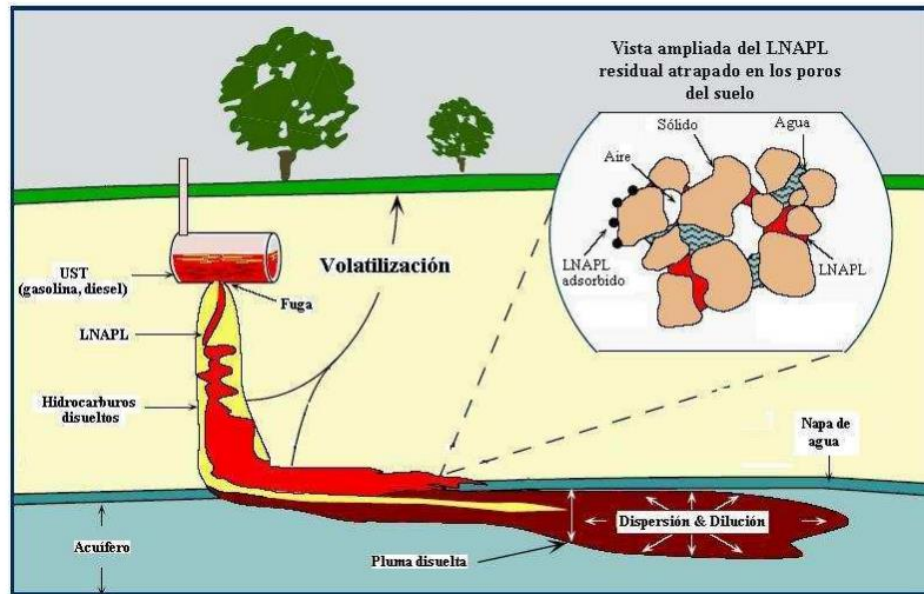


Figura 2.2 Dispersión de hidrocarburos a partir de una fuga. Fuente: Celis, 2008.

Otro factor influyente en el movimiento de los LNAPL son las estructuras presentes, las propiedades del suelo (presión capilar, tamaño de poros, humedad inicial) y la geología de la zona donde se propaga el contaminante (Celis, 2008). Un estrato de baja permeabilidad como lo es un lente de limo o arcilla puede jugar un papel importante desviando el contaminante y haciendo que este migre lateralmente (Figura 2.3).

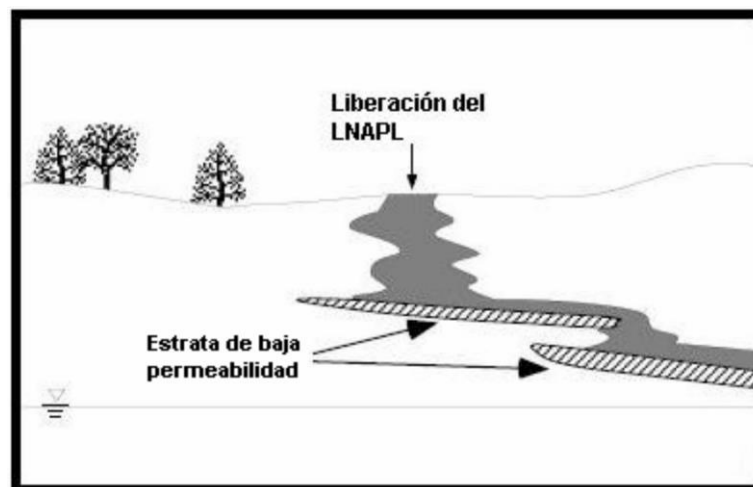


Figura 2.3 Migración del LNAPL en presencia de capas poco permeables. Fuente: Celis, 2008.

2.2.2 Factores que influncian la presencia y movimiento del BTEX en un acuífero costero

Dimensionar y cuantificar el movimiento del grupo BTEX dentro de un acuífero costero no es una tarea fácil ya que existen distintos factores que pueden influenciar la dispersión de estos.

Uno de los principales factores que condicionan la extensión de las plumas de contaminación es el tiempo y volumen en que estas sustancias son liberadas (Geng, 2017) alcanzando mayores distancias a mayor volumen durante mayores tiempos del evento contaminante.

La marea es otro factor que puede condicionar la presencia y extensión de la pluma de contaminantes debido a la influencia que tiene en la formación de una pluma salina adicional a la cuña creada comúnmente. En ambas plumas se crea una zona de reacción biogeoquímica la cual tiene influencia en la biodegradación de BTEX, sin embargo, en aquella pluma formada exclusivamente en zonas con presencia de marea se forma una zona más activa asociada a un flujo más rápido y un tiempo de residencia más corto, viéndose un efecto de biodegradación mayor (Robinson, 2007). Según resultados presentados por Robinson et, al. (2009), los efectos de la marea pueden aumentar la atenuación de los compuestos de BTEX en un acuífero no confinado producto de una biodegradación aeróbica (excepto del benceno). Cabe destacar que este mismo estudio dio como resultado una gran incertidumbre acerca del flujo y los procesos de transporte de los contaminantes orgánicos en un modelo heterogéneo.

2.3 Caracterización de un acuífero costero detrítico

Según Morell (2003) los acuíferos costeros detríticos se pueden clasificar en cinco grandes grupos:

- 1) Depósitos fluviales los cuales se encuentran formados generalmente por gravas, limos y arcillas irregularmente distribuidos. Frecuentemente presentan la existencia de paleocauces los cuales funcionan como vías preferenciales de flujo.
- 2) Depósitos aluviales y llanuras costeras actuales: en estos depósitos puede coexistir depósitos continentales y marinos. Los niveles de acuíferos se forman por gravas, conglomerados, arenas y areniscas. Presentan niveles de baja permeabilidad separando los niveles de gravas y conglomerados.
- 3) Depósitos deltaicos: estos depósitos presentan una sucesión de facies grano creciente hacia arriba, presentando sedimentos desde grava – arena a limos y arcillas.
- 4) Terrazas, conos y depósitos antiguos.
- 5) Dunas costeras: No presentan grandes discontinuidades, sin embargo, los depósitos de mayor rango pueden ser heterogéneos. Si bien se encuentran en menor frecuencia en la naturaleza, en Chile la gran cantidad de dunas próximas a la costa sugiere que este tipo de acuífero podría ser común.

Dado que los acuíferos costeros detríticos no se desarrollan exclusivamente en ambientes fluviales o aluviales, se generan variaciones en facies tanto verticales como laterales por lo cual el medio se convierte en anisótropo y heterogéneo. Es muy común que se generen condiciones semiconfinadas llegando incluso a confinadas (Morell, 2003). Lo anterior, produce que propiedades como la conductividad hidráulica varíe de gran manera tanto horizontal como verticalmente (Figura 2.4). Estos cambios pueden llegar a ser de varios ordenes de magnitud condicionando el movimiento tanto del agua como de los componentes disueltos en ella (Zheng and Jiao, 1998).

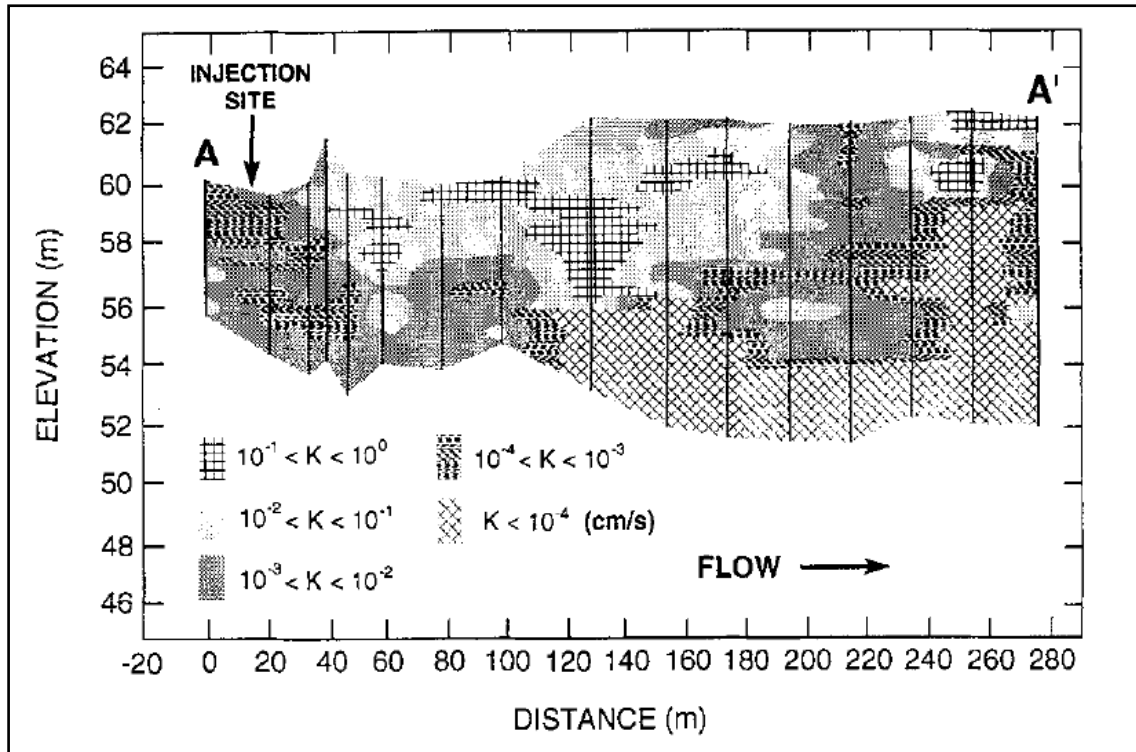


Figura 2.4 Ejemplo de la distribución espacial de conductividades hidráulicas presentes en un acuífero detrítico mixto. Se pueden ver las distintas variaciones de magnitud. Fuente: Zheng y Jiao, 1998.

El proceso de salinización en los acuíferos costeros detríticos se produce lentamente y se ve afectado por procesos de difusión (Morell, 2003), sin embargo, otros procesos hacen que esto se produzca de manera más concentrada a través de rasgos litorales o heterogeneidades del medio por el cual circula el agua (Bocanegra y Custodio, 1994).

Cabe destacar que la forma más común de utilización de un acuífero costero detrítico es para la extracción de agua subterránea mediante pozos. Esta extracción debe presentar una compensación con la recarga, de lo contrario, de iniciaría un proceso de penetración de la cuña de agua de mar y una expansión de la zona de mezcla lo cual puede culminar en la salinización de las captaciones de los pozos (Figura 2.5) (Bocanegra y Custodio, 1994).

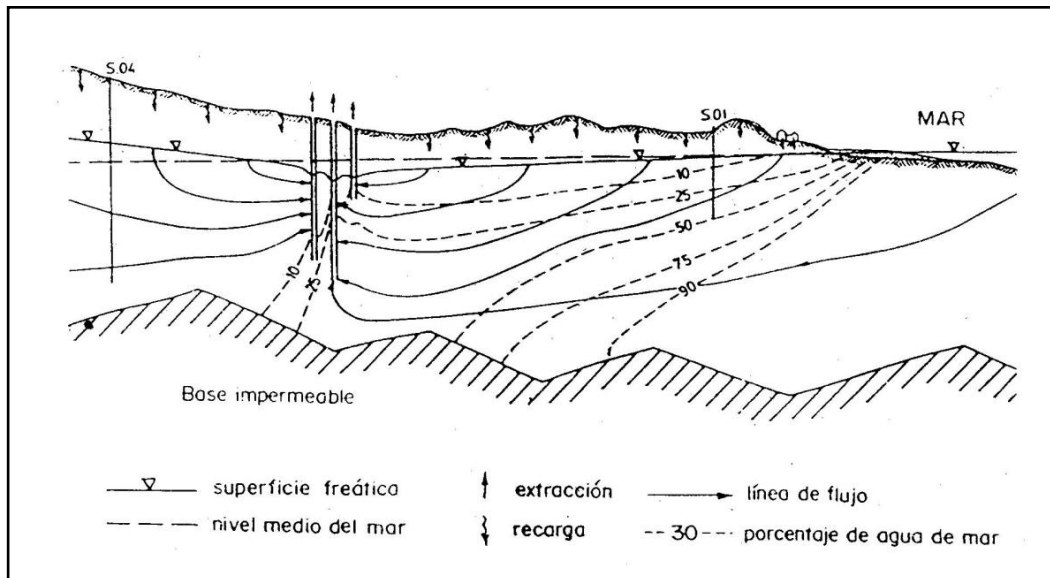


Figura 2.5 Esquema de flujo en un acuífero costero con intrusión marina. Se puede ver que las extracciones de los pozos son una mezcla de agua marina y agua subterránea proveniente del continente. Fuente: Bocanegra y Custodio, 1994.

2.4 Geología inferida para los acuíferos costeros en Chile

Chile se caracteriza por una extensa área de contacto con el mar, sin embargo, los estudios existentes respecto a los acuíferos costeros a lo largo del país son limitados, encontrándose información más detallada en la zona centro norte del país.

Cercano a la IV región de Coquimbo es posible encontrar suelos muy pedregosos, donde se identifican zonas arenosas ubicadas en el lecho de los barrancos y zonas arcillosas y limosas ubicadas en lugares con cierta pendiente. En este lugar es posible encontrar acuíferos libres compuestos por gravas y arenas gruesas, los cuales forman parte de depósitos aluviales (Squeo et al., 2006). Otro estudio, centrado en la cuenca del río Aconcagua ubicado en la V región de Valparaíso, describe la existencia de dos acuíferos, uno superior de carácter libre compuesto de materiales fluviales como gravas y arenas muy permeable con una buena capacidad de almacenamiento y uno inferior, de carácter confinado, separado del anterior por una capa arcillosa (DGA, 2004).

Los modelos a implementar necesitan de información mineralógica. Dado que no se tienen estudios detallados acerca de la composición de los sedimentos en la zona costera, se asume que estos, en su mayoría, tendrían un origen volcánico y plutónico dada la gran densidad de rocas de este tipo encontradas en el país (SERNAGEOMIN, 2003). Para el caso de las rocas de origen volcánico se consideran representativas las andesitas ya que es un tipo de roca común en la Cordillera de los Andes, mientras que, para el de las rocas plutónicas se considera representativa la composición del granito pues es una de las rocas más abundantes en la corteza continental superior.

El granito es una roca ígnea plutónica compuesta principalmente por cuarzo, feldespato potásico, plagioclasa rica en sodio y micas.

Las rocas de composición andesítica son aquellas que presentan minerales de plagioclasa, hornblenda, piroxenos y biotita. Pueden presentar, además, cuarzo en menor proporción.

3. Construcción de modelos de transporte reactivo

Para la realización de los modelos de transporte reactivo se considera una zona saturada ubicada en la proximidad de la costa donde existe la presencia de un acuífero costero detrítico, con material principalmente conformado por arena, además de un lente de limo y uno de arcilla. Esta parte del acuífero presenta un aporte de agua de mar (Figura 3.1).

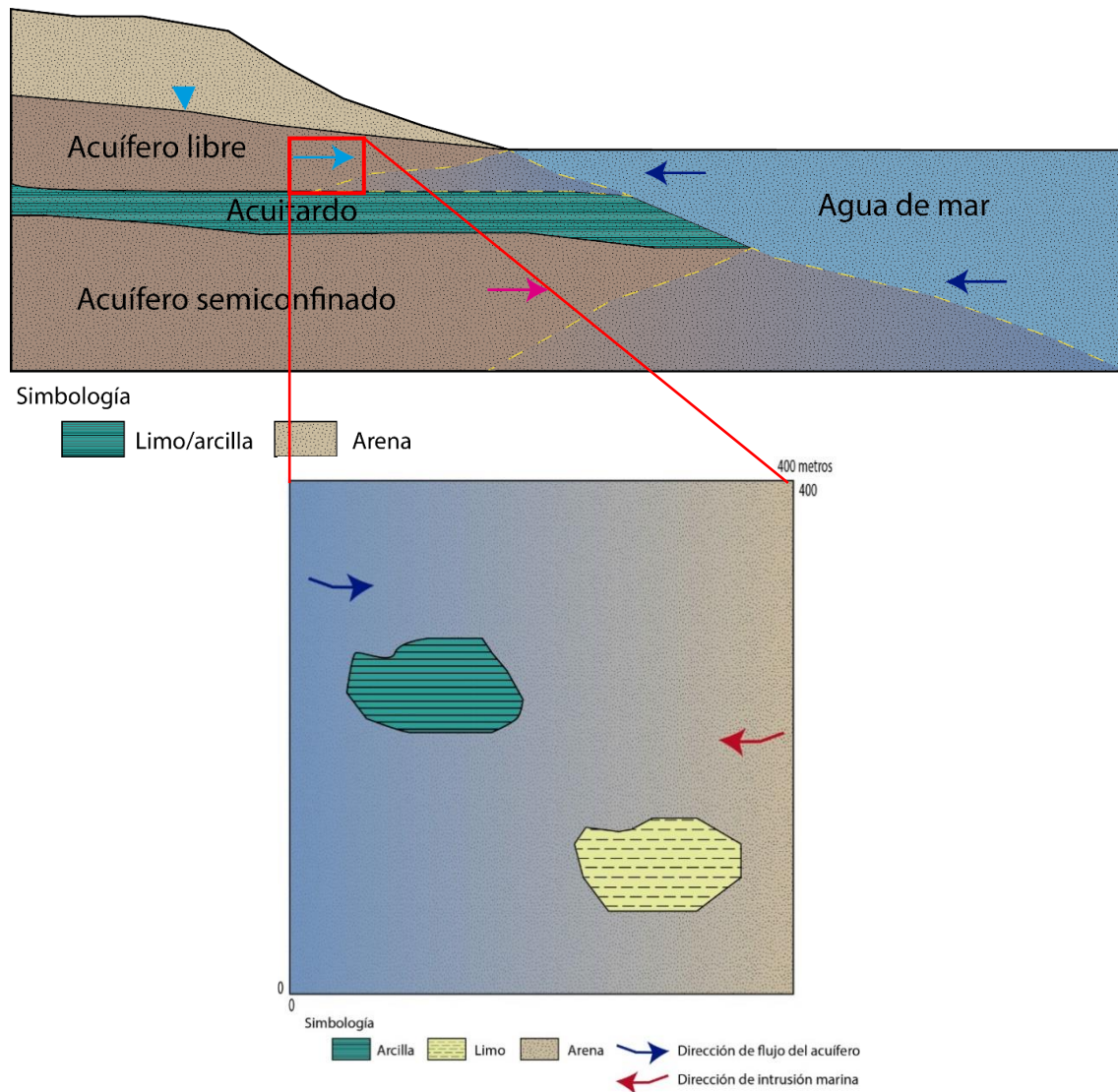


Figura 3.1 Modelo conceptual y esquema base para los modelos de transporte reactivo. Fuente: elaboración propia.

La intrusión marina no es el único fenómeno presente considerado para las simulaciones, también se presenta la existencia de una contaminación por componentes orgánicos (grupo BTEX) provocada por un derrame.

Las condiciones anteriormente nombradas se representan como dos modelos distintos con el fin de dilucidar como la intrusión marina influyen en la dinámica de los contaminantes orgánicos. Ambos modelos son realizados en un plazo de 60 años dada las limitaciones del programa que impiden un lapsus de tiempo mayor, además, se considera un tiempo adecuado para calcular el impacto de ambos contaminantes en el sistema.

En cuanto a la mineralogía, se consideran ciertos minerales presentes en los granitos y andesitas ya que son rocas muy comunes en Chile, por lo cual, muchos sedimentos pueden tener parte de esta composición. Se agrega un mínimo porcentaje de yeso el cual es capaz de precipitar en zonas costeras (West et al, 1979). Se utiliza un flujo horizontal de agua dulce constante de $10 \text{ m}^3/\text{m}^2/\text{año}$ considerado como un flujo promedio en un acuífero costero detrítico, además, no se considera una componente vertical actuando solamente una componente de gravedad.

Finalmente, se realizan modelos variando diferentes parámetros iniciales como la temperatura del sistema, el pH de las aguas y la configuración espacial de los lentes de limo y arcilla con el fin de dilucidar que parámetros son predominantes en la evolución de las aguas dentro del sistema.

3.1 Simulación de la intrusión marina

3.1.1 Definición de parámetros

La mineralogía primaria propuesta y sus porcentajes se resumen en la Tabla 3.1. Esta mineralogía varía con el fin de aumentar la porosidad inicial y, así ver la influencia de esta en el avance del modelo. Para estas simulaciones, se considera adecuada una variación de un 7% en la porosidad inicial considerando las diferencias entre un acuífero con material predominantemente de arenas limosas y uno más arenosos fino a medio.

Tabla 3.1. Volumen y minerales utilizados en la simulación en CrunchFlow para el caso de intrusión marina. Fuente: Elaboración propia.

Mineral modelado	Volumen 1 (%)	Volumen 2 (%)
Albita	29	26
Cuarzo	28	26
Feldespato potásico	28	26
Yeso	3	3
Porosidad	12	19

Es importante destacar que los minerales modelados no representan una zona en particular, modelando minerales comunes en rocas ígneas en razones iguales.

En relación con la química del agua, se utiliza la composición de la muestra del pozo 11 como representativa de un agua de recarga, esta se modifica con el fin de adicionar los iones necesarios para poder modelar la mineralogía propuesta. Lo mismo se hace con la muestra de agua de mar. Las concentraciones agregadas no superan los $1,00E-09$ moles (Tabla 3.2).

Tabla 3.2. Composición química del agua inicial presente en el acuífero y del agua de mar utilizada en el escenario de intrusión marina. Fuente: Elaboración propia.

Especies	Agua inicial (mol/kg)	Agua de mar (mol/kg)
Al+++	1,00E-09	1,00E-09
HCO ₃ ⁻	1,45E-03	2,06E-03
Ca ⁺⁺	8,71E-04	1,01E-02
Cl ⁻	9,39E-04	5,46E-01
H ⁺	9,28E-08	2,02E-08
K ⁺	7,24E-05	1,15E-02
Mg ⁺⁺	4,81E-03	5,12E-02
Na ⁺	1,81E-03	4,53E-01
SO ₄ ⁻⁻	9,56E-04	2,50E-02
SiO ₂ (aq)	1,00E-09	1,00E-09
pH	7,06	7,79

Finalmente, la permeabilidad modelada para la zona es de $1,0E-05$ m/s considerando una permeabilidad cercana a una arena fina a media. Este parámetro cambia en los sectores donde se ubican los lentes de limo y arcilla presentando $1,5E-06$ y $1,5E-07$ m/s respectivamente. Además, donde se produce la descarga del flujo hacia el mar se impone una permeabilidad de $1,5E-04$ m/s.

3.1.2 Escenario implementado

El bloque simulado posee dimensiones de 400×400 m², tomando un tamaño de celda de 4 metros en ambos ejes (Figura 3.2). Un ejemplo de código se puede ver en el Anexo A. Se ubica la entrada de intrusión en la pared opuesta a la que recibe el flujo de agua dulce con el propósito de simular la intrusión marina.

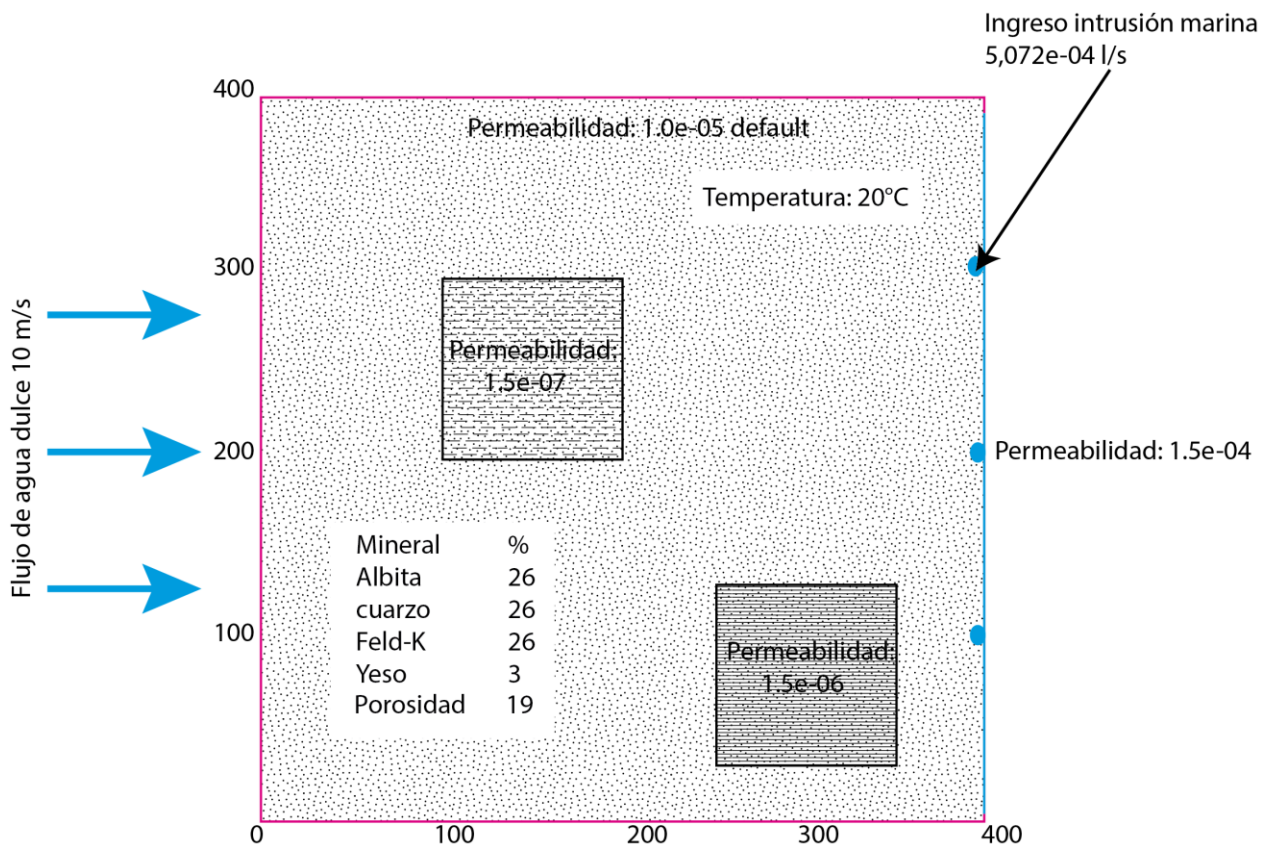


Figura 3.2 Esquema de la configuración de variables en la simulación de intrusión marina. Caso porosidad inicial 19%. Fuente: elaboración propia.

3.2 Escenario de contaminación por BTEX en acuífero costero salinizado

3.2.1 Definición de parámetros

La mineralogía elegida para el modelo es la misma que se utiliza en la simulación de intrusión marina (Tabla 3.1).

La química del agua es modificada. Además de las especies agregadas para poder simular los minerales propuestos, se procede a agregar concentraciones de benceno y ácido acético. El ácido acético es agregado ya que es un producto común en la oxidación de componentes orgánicos como lo son los hidrocarburos. En el caso del agua de mar, se agrega en concentraciones despreciables ($1,00E-090$ mol/kg), mientras que, para el caso del agua contaminada, se buscan concentraciones que demuestren una contaminación real y se agrega, además, tolueno y etilbenceno ya que son componentes del grupo BTEX. Las concentraciones ubicadas en un acuífero de la ciudad de Tyler, Alabama (EE. UU) (Amat, 2012) son las elegidas para esta simulación. Un resumen de las especies presentes es mostrado en la Tabla 3.3.

Tabla 3.3. Composición química utilizada en el escenario de contaminación. Fuente: elaboración propia.

Especies	Agua contaminada (mol/kg)	Agua de mar (mol/kg)
Al+++	1,00E-09	1,00E-09
HCO3-	1,45E-03	2,06E-03
Ca++	8,71E-04	1,01E-02
Cl-	9,39E-04	5,46E-01
H+	9,28E-08	2,02E-08
K+	7,24E-05	1,15E-02
Mg++	4,81E-03	5,12E-02
Na+	1,81E-03	4,53E-01
SO4--	9,56E-04	2,50E-02
SiO2(aq)	1,00E-09	1,00E-09
pH	7,065	7,79
Ácido acético (aq)	1,00E-09	1,00E-09
Benceno (aq)	2,51E-03	1,00E-09
Tolueno (aq)	1,91E-04	-
Etilbenceno (aq)	6,96E-04	-

3.2.2 Escenario implementado

El bloque simulado posee dimensiones de 400x400 m², tomando un tamaño de celda de 4 metros en X y de 4 metros en Y (Figura 3.3). Se varían los puntos de entrada de la intrusión marina con respecto al modelo anterior con la intención de mostrar una mayor área donde exista interacción entre el contaminante orgánico e inorgánico y así, ver la incidencia que tienen entre ellos.

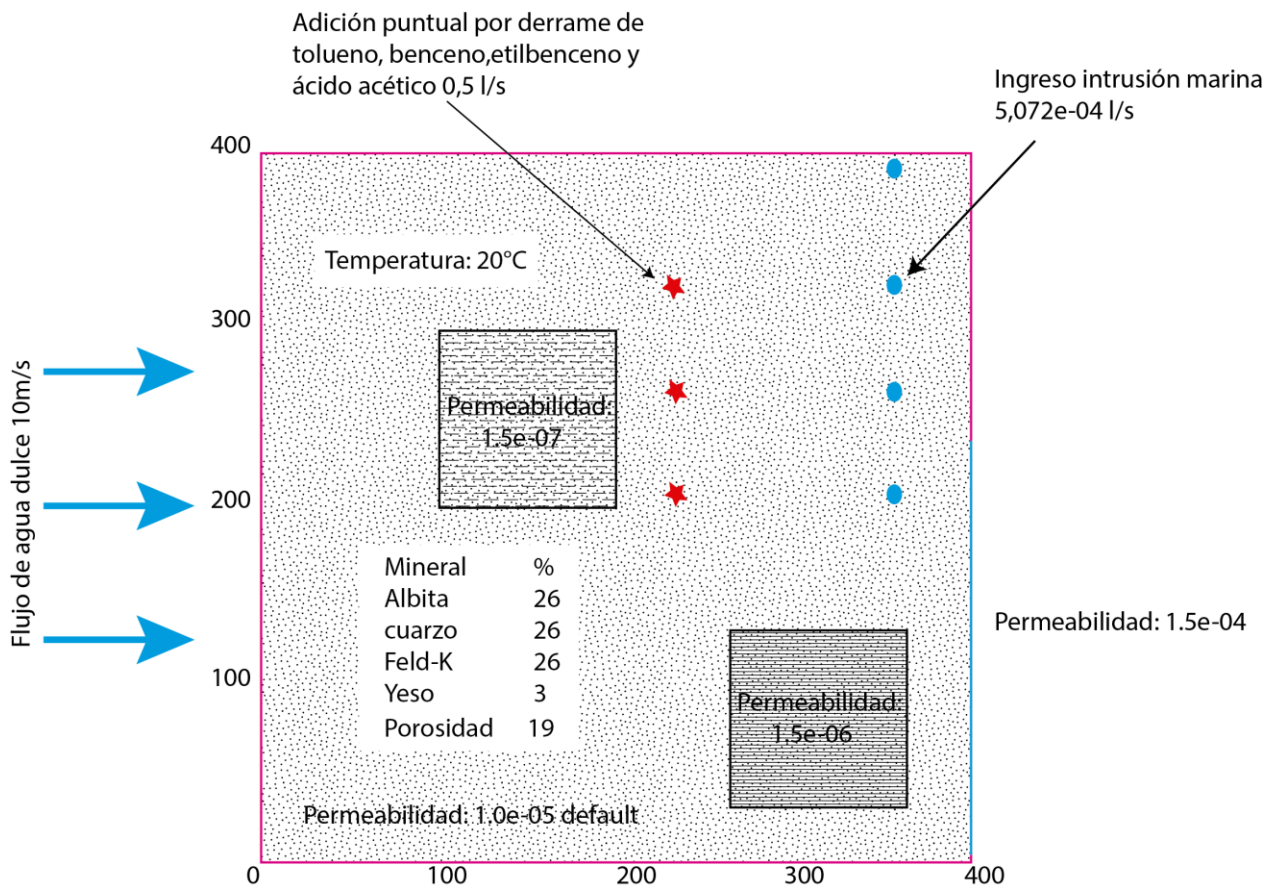


Figura 3.3 Esquema de la configuración de variables en la simulación de contaminación. Caso porosidad inicial 19%. Fuente: elaboración propia.

4. Resultados y discusiones

4.1 Hidrogeoquímica

4.1.1 Esquema de los pozos

Las muestras analizadas presentan un error admisible en el balance iónico teniendo un valor igual o menor a 5% (Hem, 1985). El balance iónico y un resumen de la química de las aguas se muestra en el Anexo B. La configuración elegida para los pozos se muestra a continuación (Figura 4.1) donde se consideran pozos someros y profundos a lo largo de una línea de flujo.

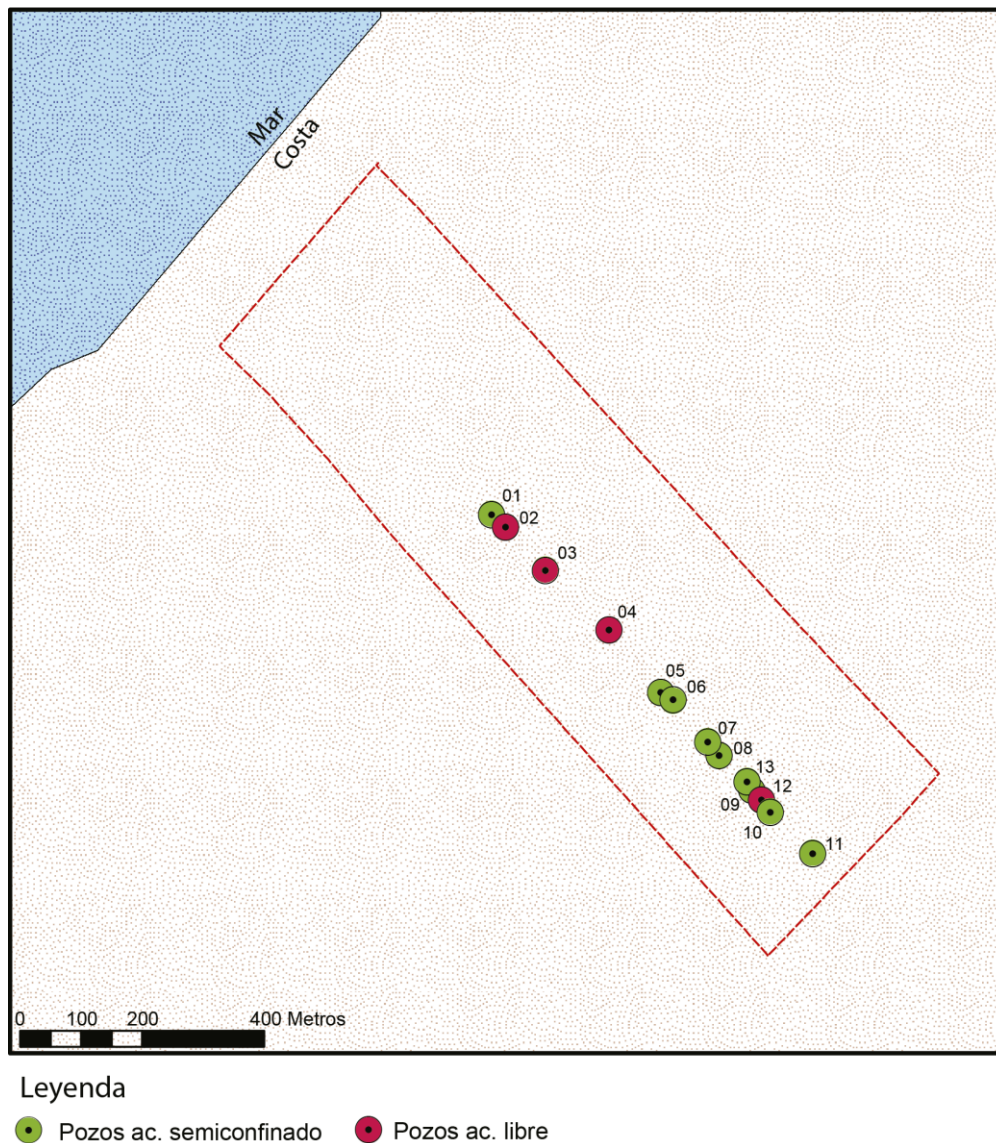


Figura 4.1 Distribución en planta de las muestras utilizadas. Fuente: elaboración propia.

4.1.2 Composición química del agua subterránea

Para identificar el tipo de agua presente en el acuífero se graficaron las distintas muestras en un diagrama de Piper (Figura 4.2).

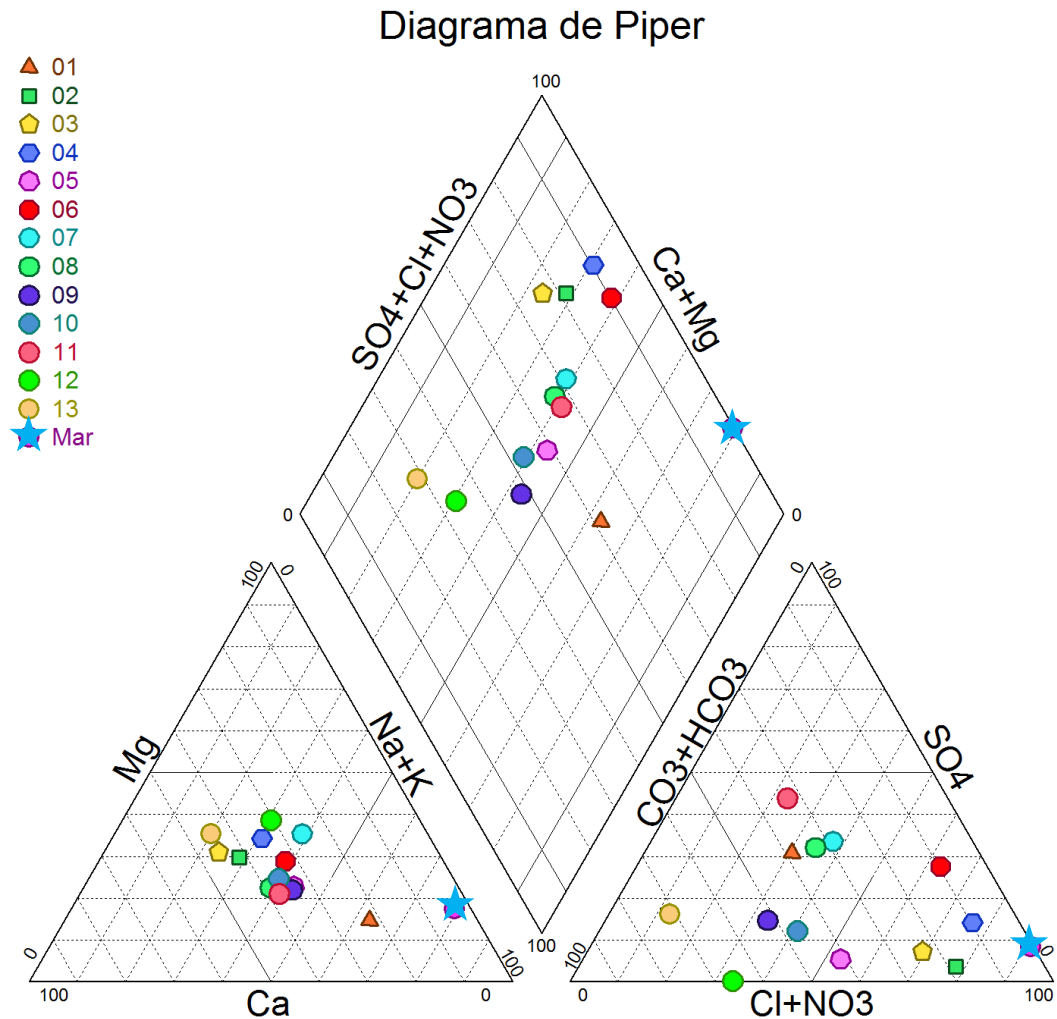


Figura 4.2 Diagrama de Piper. Fuente: elaboración propia

De la figura 4.2 se extrae que, en su mayoría, las muestras de agua corresponden a aguas sulfatadas y/o cloruradas cálcicas y/o magnésicas. Un resumen detallado del tipo de agua por muestra se observa en la tabla 4.1.

Tabla 4.1 Tipo de agua por muestra y carácter del acuífero. Fuente: elaboración propia.

Muestra	Tipo de agua	Carácter del acuífero
01	Sulfatada (bicarbonatada) sódica	Acuífero inferior
02	Clorurada cálcica - magnésica	Acuífero superior
03	Clorurada cálcica - magnésica	Acuífero superior
04	Clorurada magnésica - cálcica	Acuífero superior
05	Clorurada sódica - cálcica	Acuífero inferior
06	Clorurada sódica - cálcica	Acuífero inferior
07	Clorurada y sulfatada sódica - magnésica	Acuífero inferior
08	Sulfatada (bicarbonatada) cálcica -sódica	Acuífero inferior
09	Bicarbonatada sódica - cálcica	Acuífero inferior
10	Bicarbonatada sódica - cálcica	Acuífero inferior
11	Sulfatada (bicarbonatada) sódica - cálcica	Acuífero inferior
12	Bicarbonatada magnésica - cálcica	Acuífero superior
13	Bicarbonatada cálcica - magnésica	Acuífero inferior

De la tabla 4.1 se ve que, en general, las muestras siguen una tendencia pasando de bicarbonatadas a sulfatadas terminando en cloruradas existiendo una relación entre la cercanía a la costa y el tipo de agua encontrado. La única muestra que no sigue esta tendencia es la muestra 01 la cual presenta un tipo de agua sulfatada (bicarbonatada) sódica muy distinta al tipo de agua de la muestra 02, sin embargo, esta última es extraída del acuífero superior, mientras que, la primera del inferior.

El carácter clorurado de las muestras cercanas a la costa indica que existe intrusión marina en el acuífero.

Para un análisis acabado de la proveniencia de los elementos mayoritarios se han realizado diagramas binarios de cada componente. En la Figura 4.3 se muestran los diagramas binarios de la concentración de los elementos mayoritarios versus el cloruro.

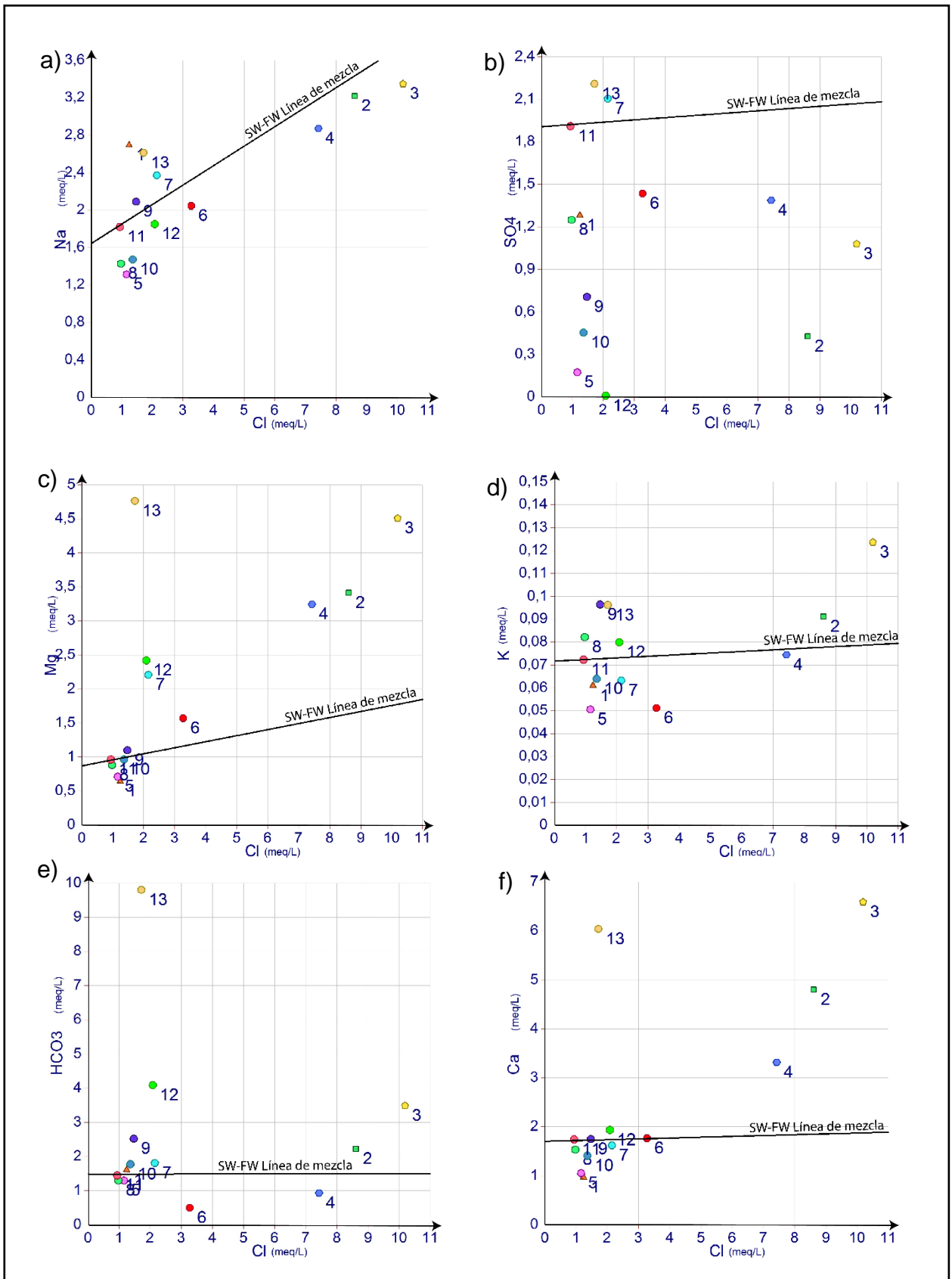


Figura 4.3 Diagramas binarios de Cl⁻ v/s elementos mayoritarios. Se representa la línea de mezcla teórica en cada diagrama. Fuente: elaboración propia.

La relación de los iones representados (Figura 4.3a) se desvía de la línea de mezcla teórica entre agua de mar y agua dulce. La relación entre SO_4^{2+} , Mg^{2+} , K^+ , HCO_3^- y Ca^{2+} con el ion Cl^- (Figura 4.3b, c, d, e y f) se desvía casi completamente de la línea de mezcla, llegando a correlacionarse de manera nula en el caso de HCO_3^- . Esto apunta que otros procesos están ocurriendo en el acuífero (disolución/precipitación y/o intercambio iónico). Se observa, además, que las muestras 02, 03 y 04 forman un grupo bien identificado lo que sugiere que pueden estar controlados por un mismo proceso.

Observando las muestras 02, 03 y 04 se observa que estas presentan exceso de Mg^{2+} y Ca^{2+} , y, presentan un déficit de Na^+ y, si bien se observan otras muestras con déficit de Na^+ y altos contenidos de Mg^{2+} y Ca^{2+} , esta diferencia con respecto a la línea teórica de mezcla no es tan notoria. Este cambio se produce debido al intercambio catiónico inverso ocurrido en el acuífero costero entre Na^+ y Ca^{2+} - Mg^{2+} , donde el sodio es capturado por las arcillas, mientras que se libera Ca^{2+} y/o Mg^{2+} pasando de aguas ricas en sodio a aguas ricas en Ca^{2+} y Mg^{2+} (Kouzana et al., 2009). La configuración química observada, ha sido utilizada en estudios anteriores como indicador de una intrusión marina (Fidelibus et al., 1993; Pulido-Leboeuf, 2004; Petalas y Lambrakis, 2006; Daniele et al., 2011; Daniele et al., 2013) por lo tanto se sugiere que la composición química de estas muestras refleja un proceso de intrusión marina actual.

Otras muestras que presentan un comportamiento similar son la 01 y 07 (Figura 4.3a) las cuales presentan un exceso de Na^+ viéndose ploteadas por encima de la línea de mezcla teórica de agua dulce – agua de mar de Na^+ v/s Cl^- , mientras que, en el caso del Ca^{2+} v/s Cl^- (Figura 4.3f) estas muestras se encuentran ploteadas bajo la línea de mezcla. Este exceso de Na^+ se puede dar por un intercambio catiónico directo de la arcilla, donde se produce una liberación de Na^+ en la solución y una captura de Ca^{2+} en el sustrato. Ya que los pozos del que se extraen estas muestras se encuentran habilitados en el acuífero inferior, bajo lentes de arcilla y limo, se plantea que estos desempeñan un papel de barrera contra la intrusión marina (Kouzana et al., 2009).

4.1.3 Cálculo del factor salino

El factor salino permite calcular el porcentaje de agua de mar en las muestras analizadas. La muestra 11 se considera representativa del agua dulce dado que presenta el menor contenido de cloruro y los resultados se muestran en la Tabla 4.2, además, se pueden ver gráficamente en la Figura 4.4.

Tabla 4.2 Factor salino calculado a partir de las concentraciones de Cl⁻ por muestra. En rojo se muestra el ejemplar de agua de mar y la muestra representativa del agua de recarga. Fuente: elaboración propia.

Muestra N°	Cl ⁻	Factor salino
	mg/L	%
01	44,1	0,05
02	305	1,41
03	361	1,70
04	263	1,19
05	41	0,04
06	116	0,43
07	75,9	0,22
08	34,8	0,01
09	52,1	0,09
10	48,2	0,07
11	33,3	0
12	73,6	0,21
13	61	0,14
Agua de Mar	19205	100

Los resultados indican un aporte de agua de mar bajo, con valores que varían desde 0,01% en la muestra 08 llegando a un máximo de 1,7% en la muestra 03 (Tabla 4.2). Se puede apreciar que existe un notorio aumento en el factor salino en aquellas muestras más cercanas a la costa (02, 03 y 04), mientras que, aquellas más lejanas a la costa presentan los valores más bajos. Los valores de los pozos 02, 03 y 04 son similares al 2% propuesto por Pulido-Bosch (2007) para considerar un agua con problemas de potabilidad. Estos valores indican que el agua de esa zona del acuífero no sería apta para consumo humano.

La muestra 01 no sigue el patrón anteriormente propuesto presentando un porcentaje de agua mar bajo, aunque se encuentra cercana a la costa (Figura 4.4). Esto se explica debido a que la muestra es extraída del acuífero inferior, bajo un estrato de arcilla, el cual actúa como una barrera natural y atenúa la acción de la intrusión.

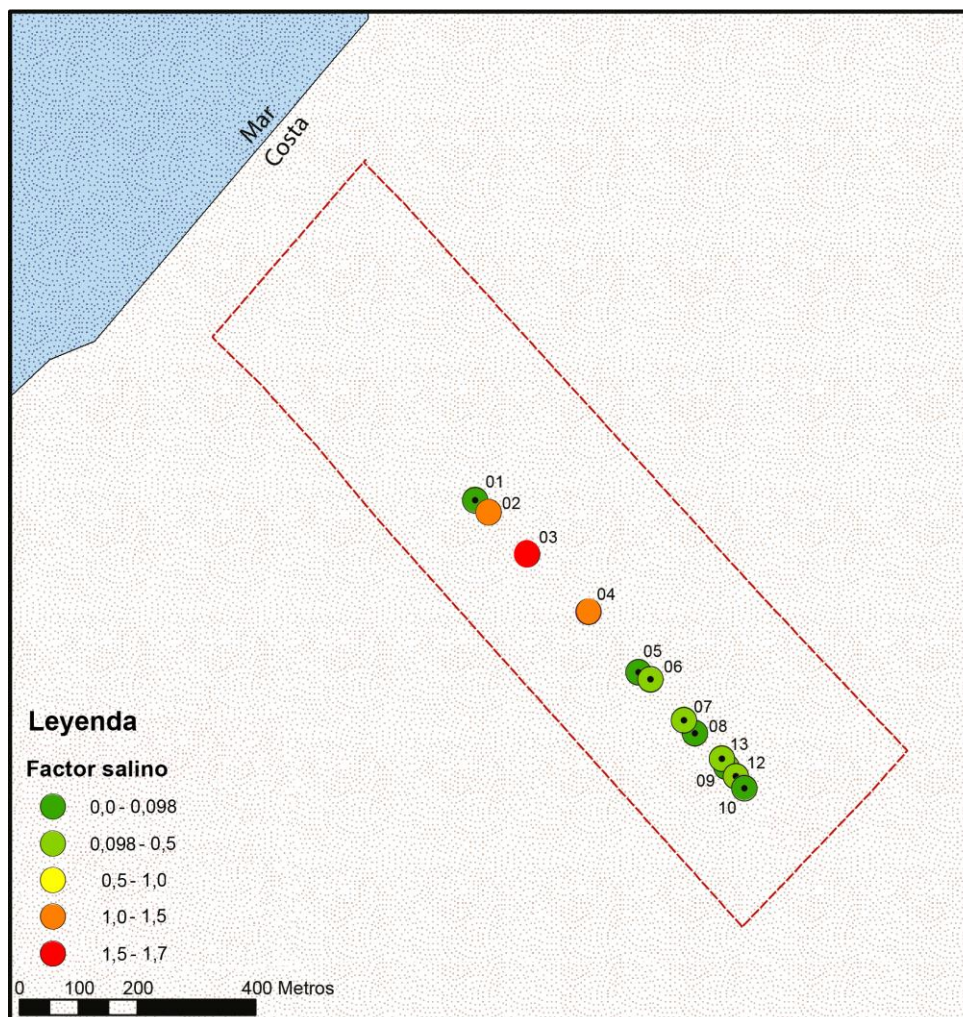


Figura 4.4 Facto salino para cada muestra. Fuente: elaboración propia.

4.1.4 Delta iónico

Del cálculo de delta iónico, el cual permite dilucidar la existencia procesos que modifican el contenido teórico de los iones de cada muestra, se obtienen los datos mostrados en la Tabla 4.3. Este delta fue calculado para los iones Mg^{2+} , Ca^{2+} , SO_4^{2-} , Na^+ y K^+ (Figura 4.5).

Tabla 4.3 Valores de delta iónico para cada una de las muestras considerando los iones Mg^{2+} , Ca^{2+} , SO_4^{2-} , Na^+ y K^+ . Fuente: elaboración propia.

Muestra	Delta iónico				
	Mg^{2+}	Ca^{2+}	SO_4^{2-}	Na^+	K^+
01	-0,37	-0,39	-0,65	0,62	-0,01
02	1,04	1,40	-2,16	-4,93	-0,13
03	1,85	2,26	-1,65	-6,11	-0,13
04	1,08	0,67	-1,09	-4,30	-0,13
05	-0,29	-0,34	-1,75	-0,68	-0,02
06	0,17	-0,02	-0,68	-1,70	-0,06
07	1,03	-0,08	0,08	-0,44	-0,03
08	-0,09	-0,10	-0,66	-0,42	0,00
09	0,04	-0,00	-1,25	-0,16	0,01
10	-0,07	-0,17	-1,49	-0,69	-0,01
12	1,26	0,07	-2,00	-0,90	-0,01
13	3,70	2,13	0,22	0,14	0,007

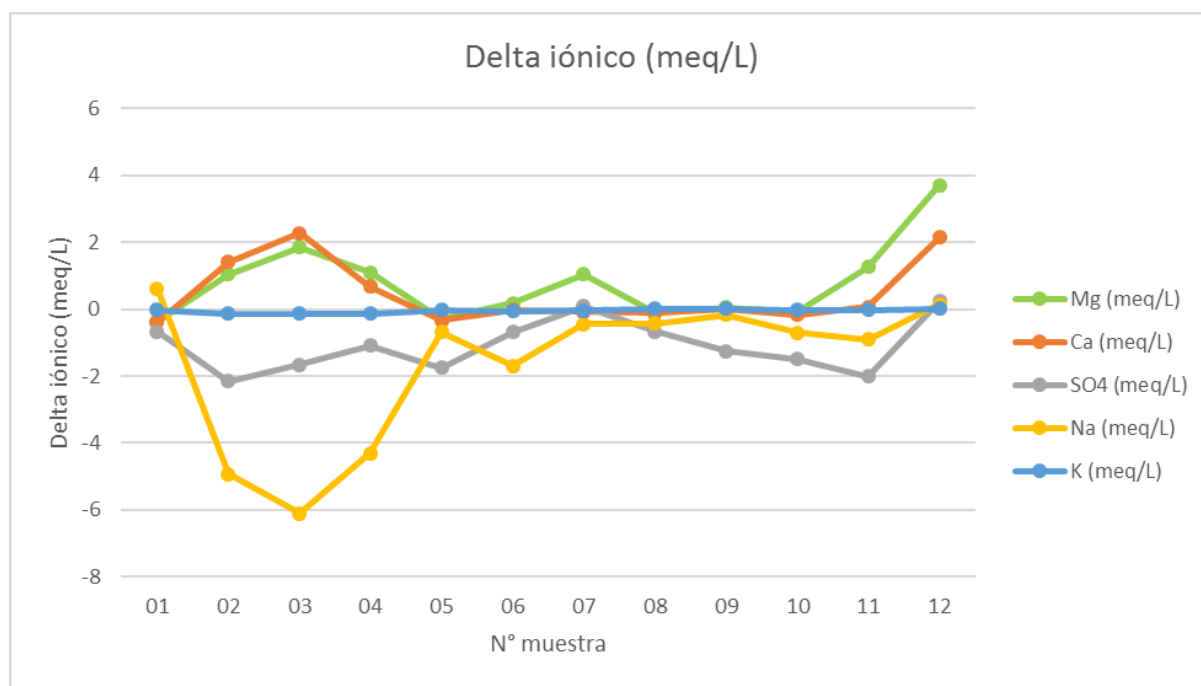


Figura 4.5 Delta iónico por muestra para los distintos iones. Fuente: elaboración propia.

Se puede observar, tanto del gráfico como de la tabla, que el K^+ tiene valores cercanos a cero indicando que dentro de la mezcla tiene un comportamiento conservativo en las muestras analizadas.

Por otro lado, en el caso de Na^+ y el Ca^{2+} tienen un comportamiento opuesto en las muestras 02, 03 y 04. Se observa que el ΔNa^+ disminuye y el ΔCa^{2+} aumenta (Figura 4.5), es decir, en aquellas muestras donde existe un déficit de Na^+ con respecto a la mezcla conservativa, se aprecia un exceso de Ca^{2+} . Esto último se puede ver también al

comparar el Na^+ y Mg^{2+} . Este exceso de Ca^{2+} y Mg^{2+} en conjunto con el déficit de Na^+ puede ser explicado debido por procesos de intercambio catiónico inverso. En el resto de las muestras este comportamiento no se cumple siempre.

En el caso del SO_4^{2-} (Figura 4.6) se ven variaciones en todas las muestras, pareciendo no seguir un patrón determinado, sin embargo, en todas las muestras parece haber un déficit con respecto a una mezcla conservativa. Los mayores cambios se dan en las muestras más cercanas a la costa. El déficit de SO_4^{2-} con respecto a una mezcla conservativa puede deberse a una precipitación de yeso ya que, debido a la intrusión marina (el menor valor de ΔSO_4^{2-} se da en la muestra 02 la cual posee un 1,4% de agua de mar) se produce una precipitación de este mineral y un déficit de esta especie con respecto a la mezcla conservativa (Boluda-Botella et al., 2004). Otro factor que puede afectar los contenidos de sulfato dentro del acuífero es la acción de bacterias sulfato reductoras que producen una biodegradación de este ion.

4.1.5 Índices de saturación

La mayoría de las muestras se encuentran subsaturadas con respecto a la calcita y a la dolomita (Figura 4.6a y b), mientras que, en el caso del yeso y halita los índices de saturación son negativos (Figura 4.6c y d).

Los índices de saturación (IS) con respecto a la calcita y la dolomita son superiores a los calculados para una mezcla teórica entre agua de mar y agua dulce (Figura 4.6a y b). Esto corrobora la existencia de procesos que adicionan Ca^{2+} y Mg^{2+} , como lo es la interacción agua roca.

Con respecto al yeso (Figura 4.6c), las muestras 03, 04 y 07 presentan un IS que coincide con el calculado en la mezcla teórica, mientras que, el resto de las muestras presentan valores menores al esperado. Esto puede indicar que existen procesos modificadores de este elemento en las muestras analizadas. Además, la acción de bacterias que utilizan los sulfatos como aceptores finales en la respiración puede explicar la reducción y déficit de este ion (Corrales et al., 2015).

En el caso de la halita, las muestras se encuentran ploteadas sobre la línea de mezcla teórica entre el agua de mar y agua dulce indicando que el mar es la fuente de ambos iones en las aguas analizadas.

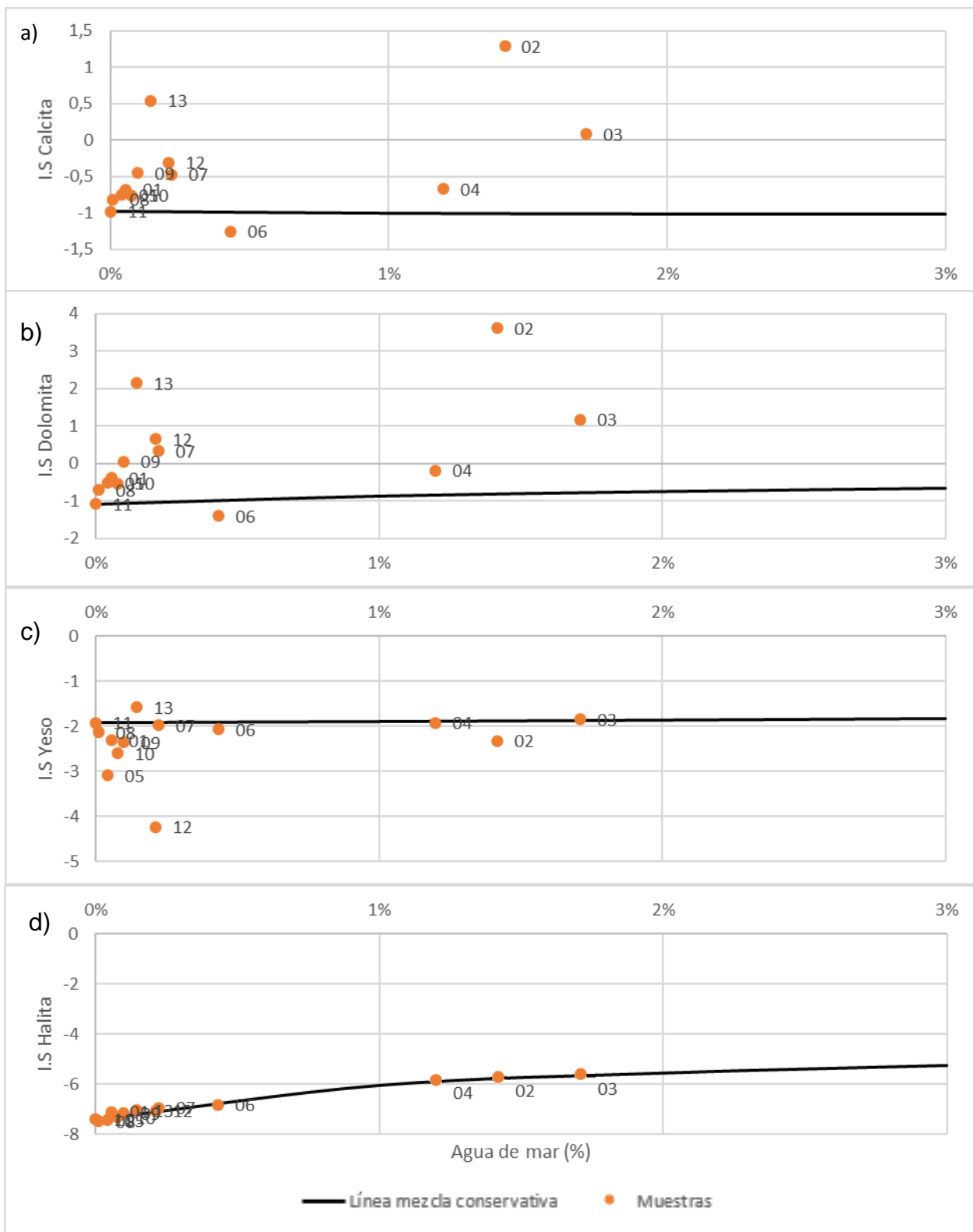


Figura 4.6 Índice de saturación de la halita para cada muestra con respecto a los IS calculados por una mezcla conservativa (línea negra continua). Fuente: elaboración propia.

4.2 Evolución del modelo de transporte reactivo de intrusión marina

Para el modelo de intrusión marina se varía la porosidad inicial con el fin de ver los cambios que este parámetro puede producir en el sistema. La primera simulación se ha realizado con un 12% de porosidad, mientras que, la segunda con un 19% de porosidad con el propósito de visualizar como una diferencia de porosidad inicial puede incidir en la propagación de las especies y en la precipitación de minerales. Las variables de interés (mineralogía primaria, secundaria, pH, porosidad y especies primarias) se plotean en 8 periodos de tiempo que son el tiempo inicial y 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 años.

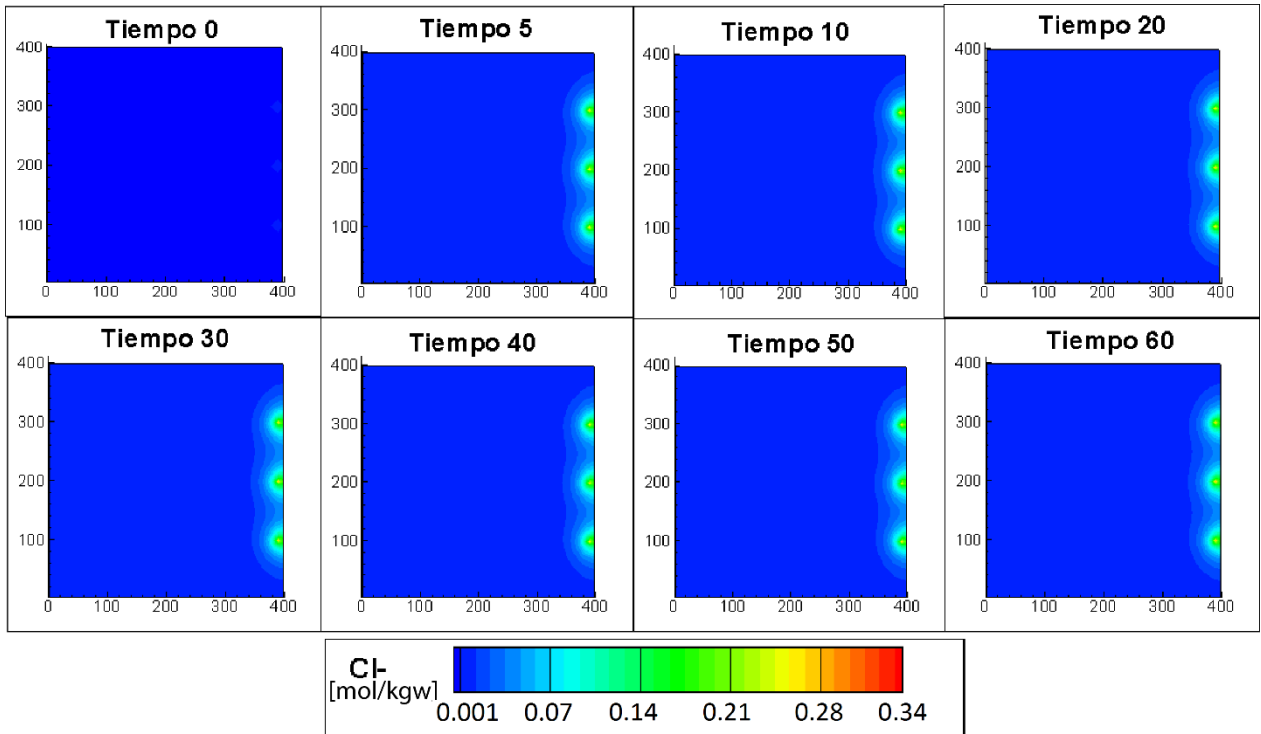
4.2.1 Evolución en la geoquímica de las aguas

Las figuras 4.7, 4.8, 4.9, 4.10 y 4.11 presentan la evolución de las especies principales en el tiempo de simulación para el modelo con el 12% de porosidad y, se comparan con los resultados con el escenario de 19% de porosidad inicial.

En los gráficos se distinguen comportamientos distintos dependiendo del ion considerado. El Cl^- , Na^+ y Mg^{2+} presentan una evolución similar (Figuras 4.7, 4.8 y 4.9). Se puede observar que las concentraciones de estos iones aumentan con el pasar de los años afectando un área de 50 metros en contra de la dirección de flujo antes de alcanzar el equilibrio. Se observa, además, que no existe variación en las concentraciones máximas y mínimas alcanzadas por estos iones comparando el modelo de 12% con 19% de porosidad inicial.

El Ca^{2+} y el SO_4^{2-} (Figuras 4.10 y 4.11) presentan una conducta similar entre si aumentando sus concentraciones de manera constante en la zona de intrusión marina durante los 60 años, mientras que, en la zona donde se encuentra la entrada de flujo de agua dulce se ve una disminución de las concentraciones de estos iones a partir de los 20 años de simulación. La variación en las concentraciones de ambos iones indica que están interactuando químicamente con las especies presentes en el sistema. Dado que los cambios de cada ion son en función de sus propiedades fisicoquímicas y las propiedades del acuífero, los frentes de variación en las concentraciones son diferentes entre sí. Para el caso del Ca^{2+} se tiene un aumento en las concentraciones que alcanza los 100 metros, mientras que, en el caso de SO_4^{2-} solo se ven diferencias con respecto a la concentración inicial en 20 metros desde la intrusión, todo esto en contra de la dirección de flujo principal.

a)



b)

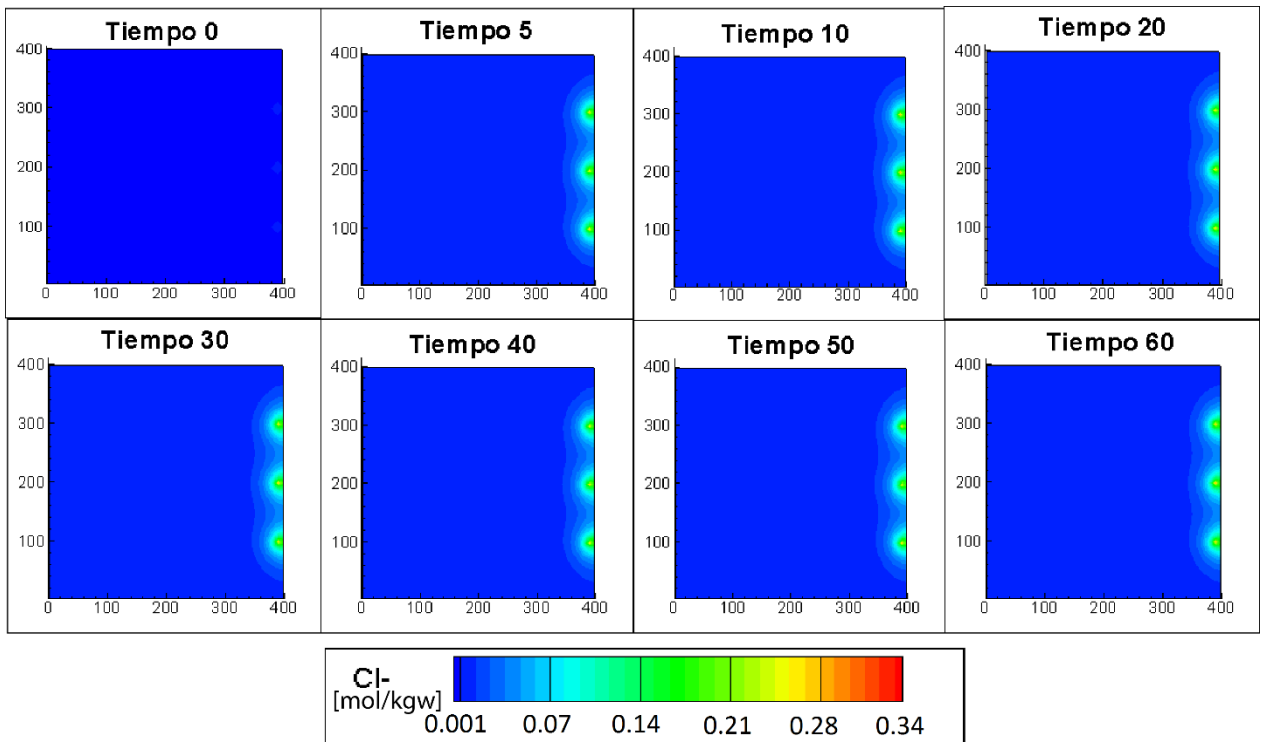


Figura 4.7 Evolución de especies primarias: a) Cl^- (12% porosidad inicial); b) Cl^- (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

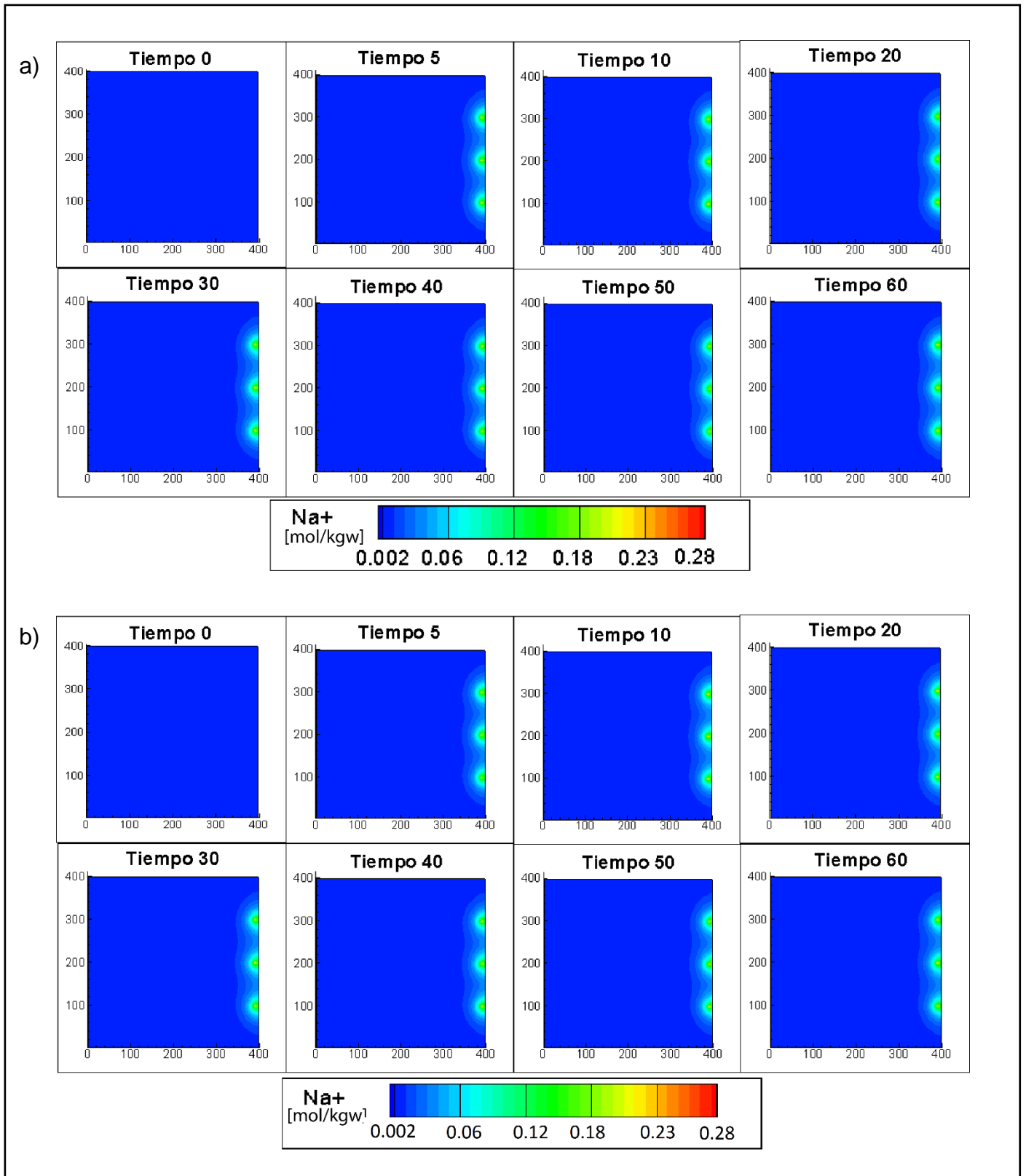


Figura 4.8 Evolución de especies primarias: a) Na⁺ (12% porosidad inicial); b) Na⁺(19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

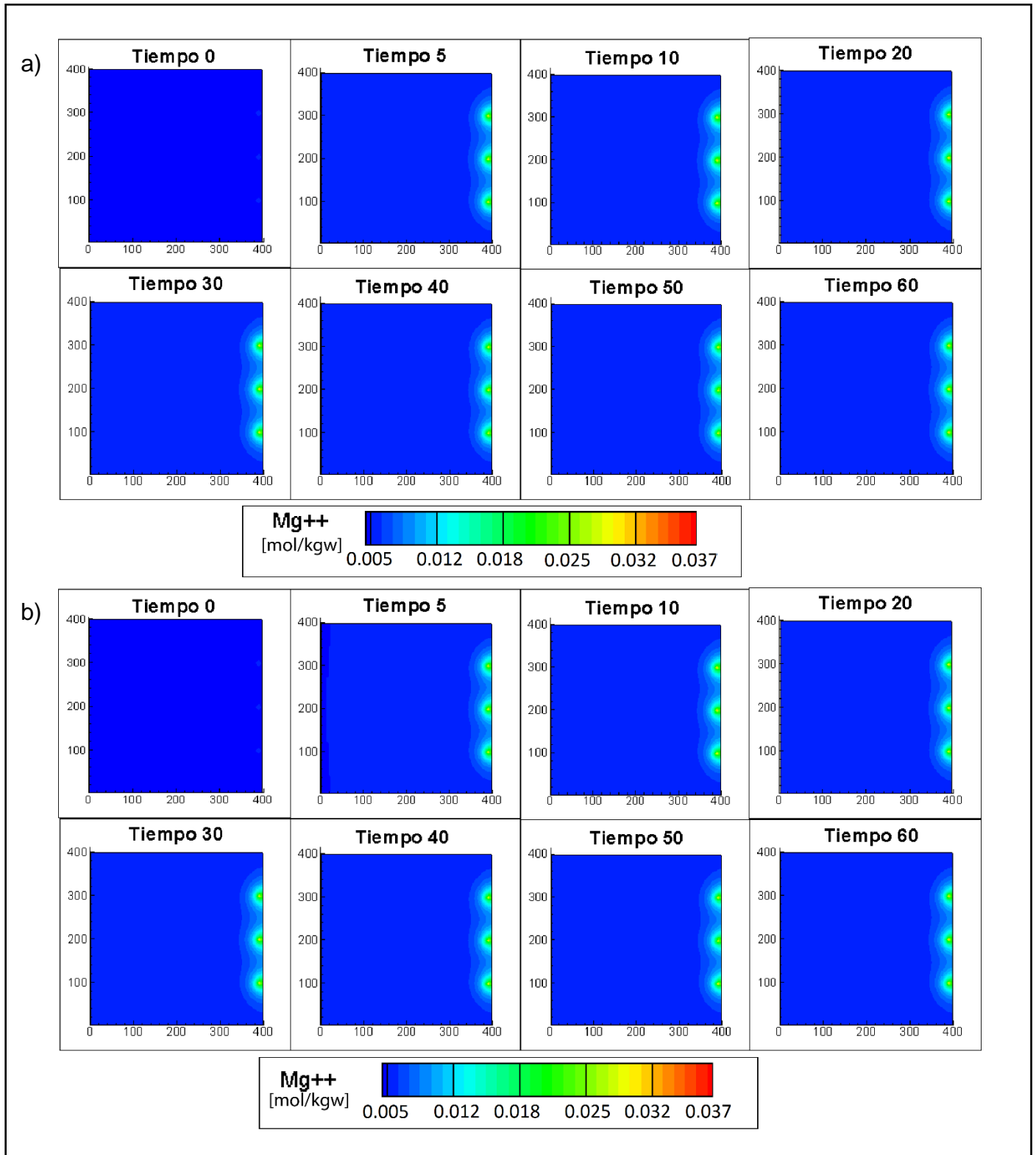
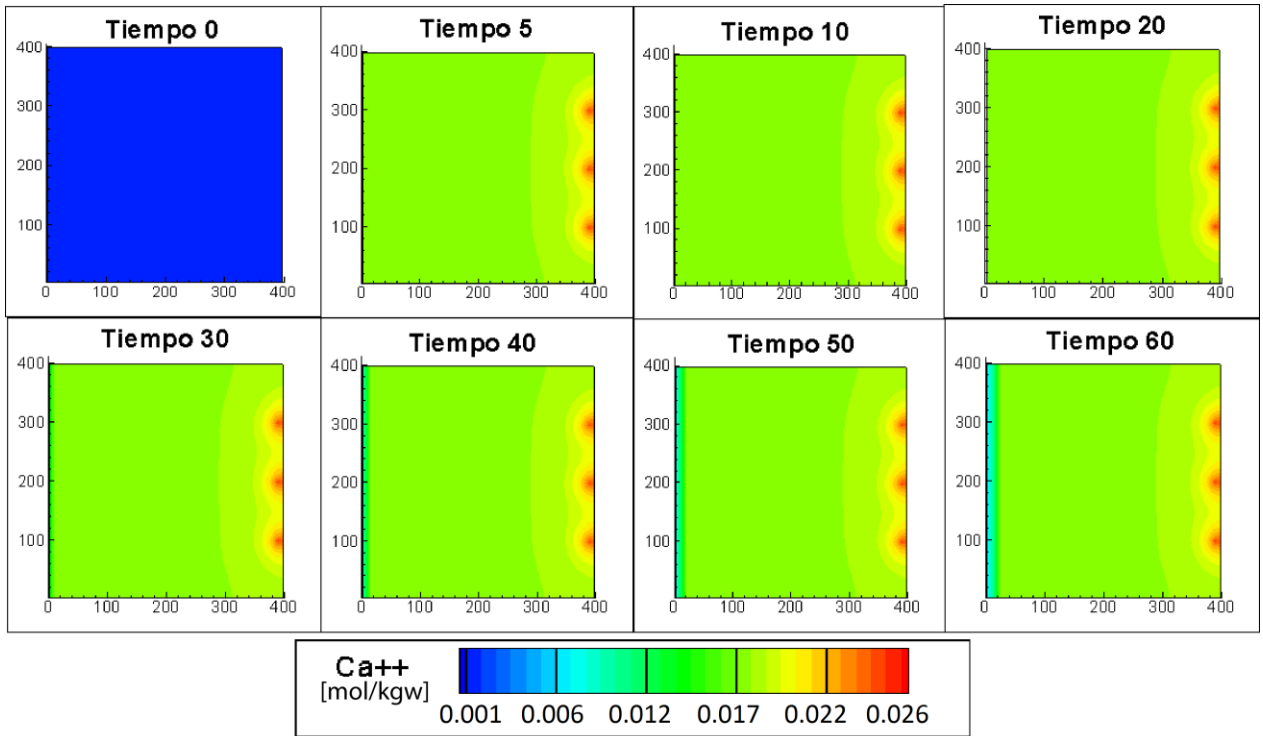


Figura 4.9 Evolución de especies primarias: a) Mg^{2+} (12% porosidad inicial); b) Mg^{2+} (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

a)



b)

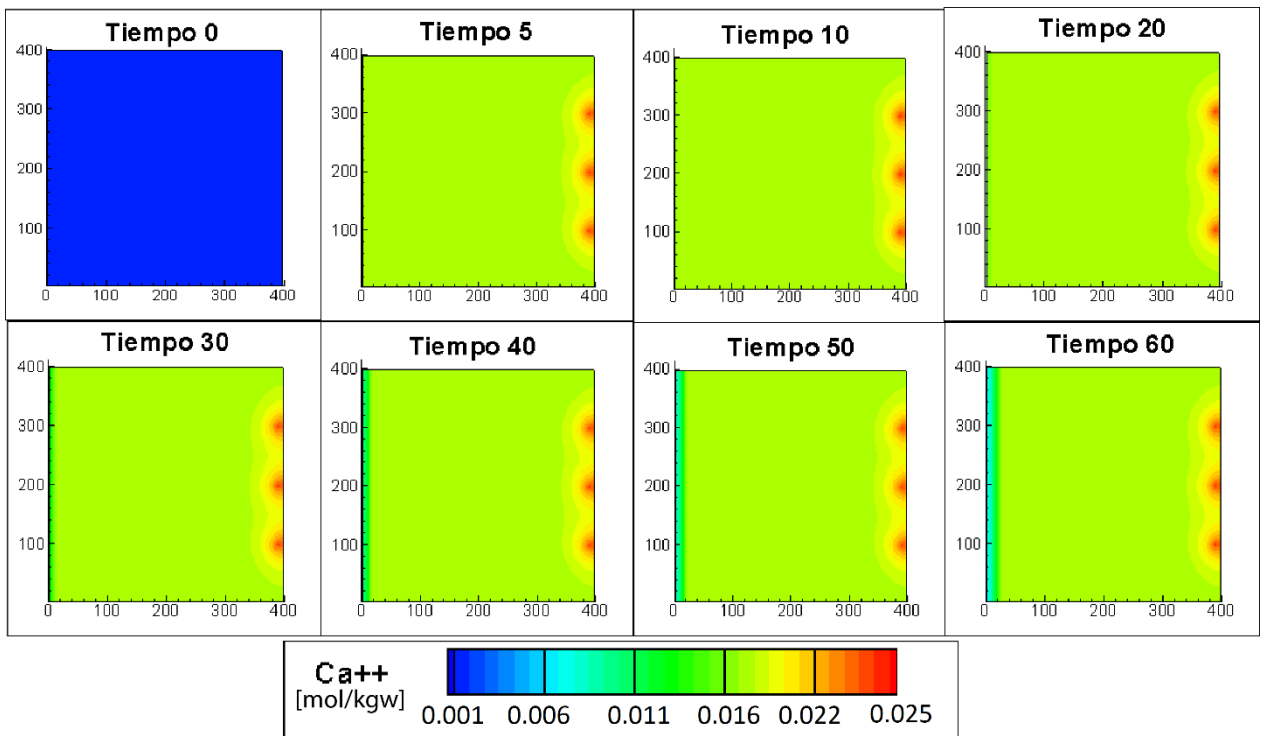


Figura 4.10 Evolución de especies primarias: a) Ca^{2+} (12% porosidad inicial); b) Ca^{2+} (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

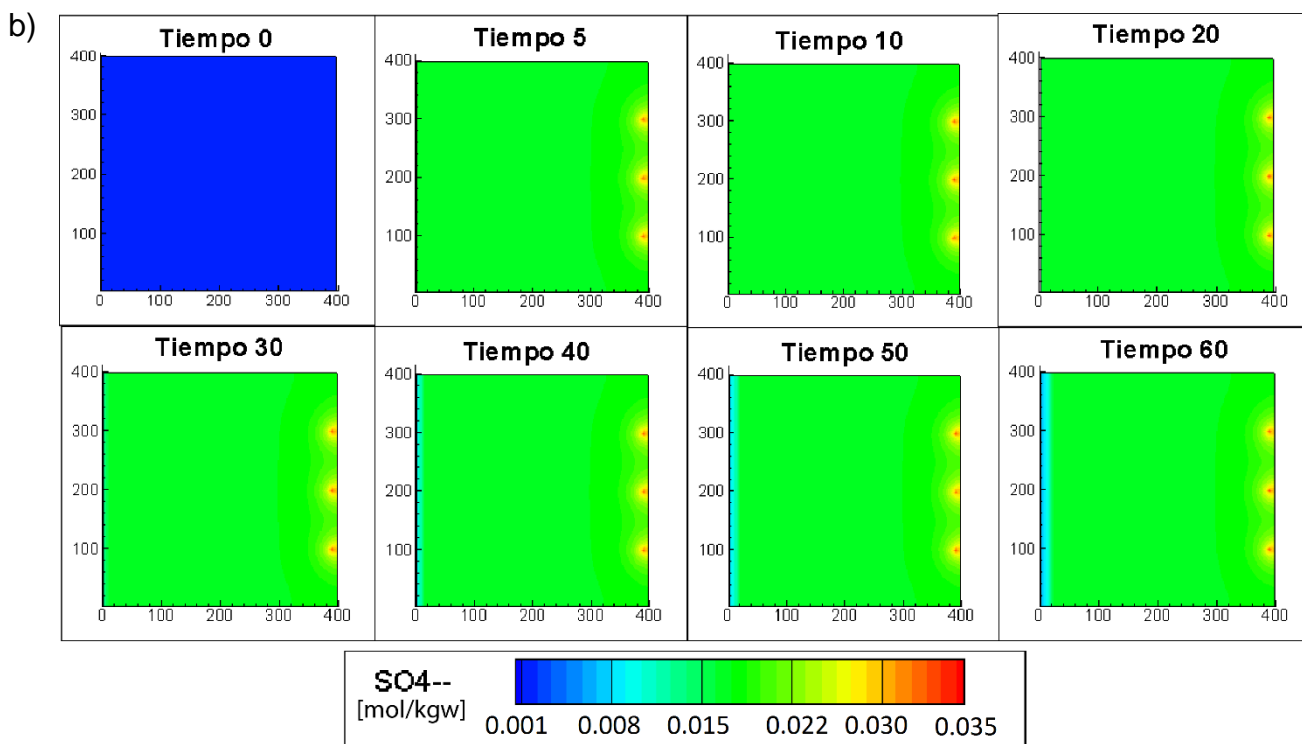
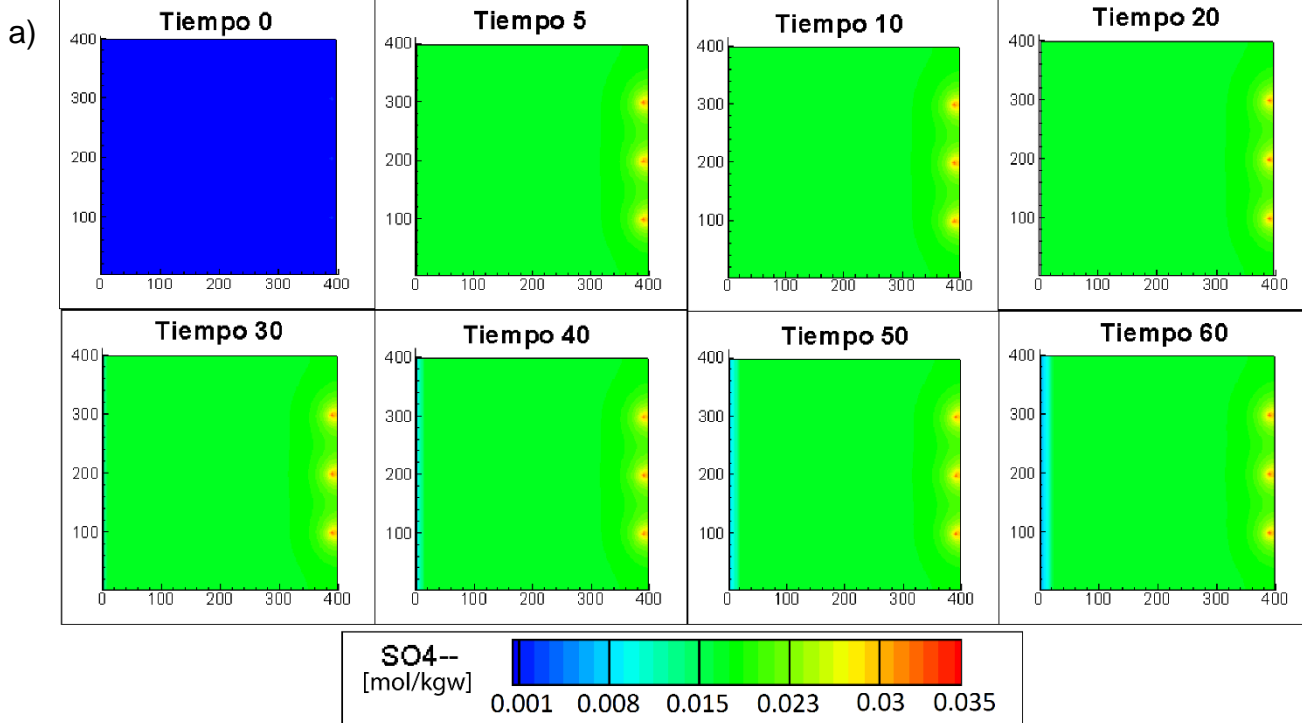


Figura 4.11 Evolución de especies primarias: a) SO₄²⁻ (12% porosidad inicial); b) SO₄²⁻ (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia

En la figura 4.12 se observa un gráfico multi – elemento donde se puede ver el comportamiento de las especies principales y el pH en la celda (240, 200). Se desprende que tanto las especies como el pH se estabilizan con el pasar de los años, alcanzando un equilibrio relativo aproximadamente a los 6 años de simulación. Esto sucede en el modelo de 12% de porosidad inicial y 19% (Figura 4.13), sin embargo, en este último el valor máximo de pH y la estabilidad se alcanza en un mayor tiempo (de 7 a 8 años).

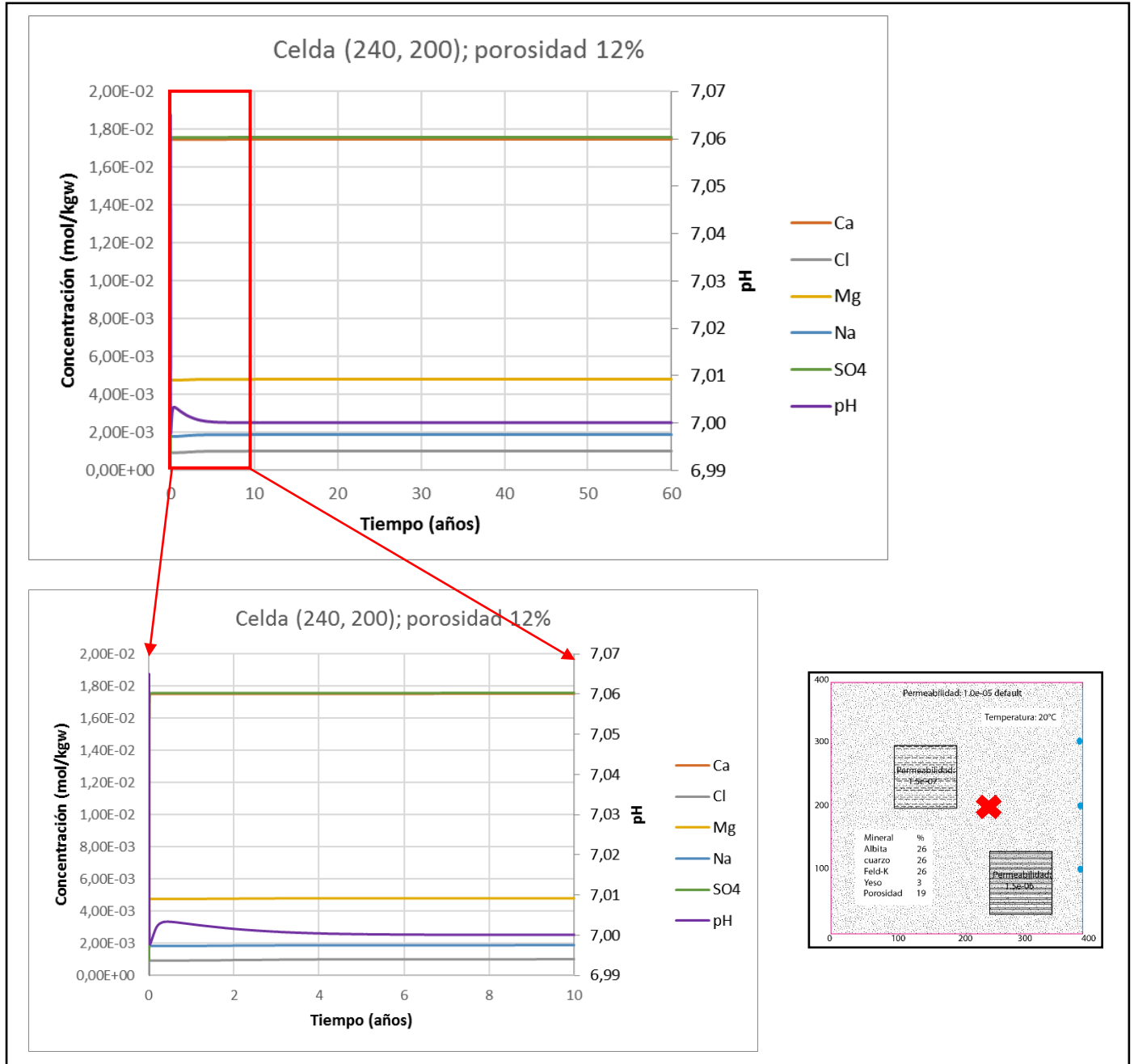


Figura 4.12 Gráfico multi – elemento en la celda 240,200 para el caso de intrusión marina – 12% porosidad inicial. En la parte inferior se observa un zoom de la zona roja.

Se observa, además, un esquema de la ubicación de la celda dentro del modelo.

Fuente: elaboración propia.

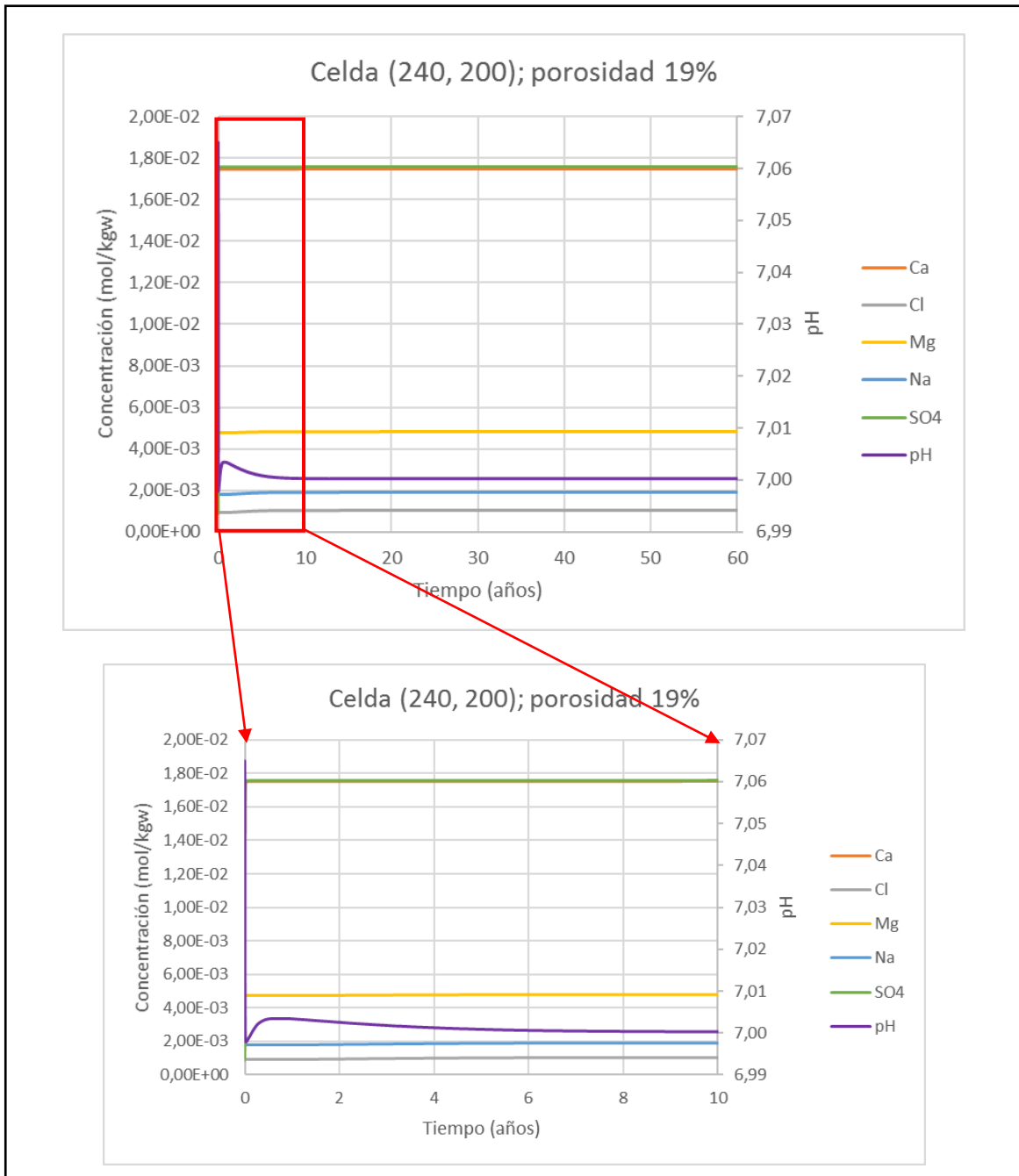


Figura 4.13 Gráfico multi – elemento en la celda 240,200 para el caso de intrusión marina – 19% porosidad inicial. En la parte inferior se observa un zoom de la zona roja.
 Fuente: elaboración propia.

4.2.2 Evolución de los minerales en la simulación

La calcita (Figura 4.14) presenta un aumento de volumen en correspondencia de la zona de intrusión, precipitando el 0,1% de este mineral a los 60 años. Esta precipitación, en el modelo, ocurre en las zonas de altas concentraciones de Ca^{2+} (Figura 4.10). En aquellos sectores donde existe una mezcla de ambos fluidos se observa que no existe una precipitación de este mineral.

La evolución del yeso (Figura 4.15) permite observar una disminución del volumen ocupado por este mineral a lo largo de una zona de 25 metros relacionada al flujo de agua dulce donde se disuelve todo el mineral tal como indica el volumen mínimo de 0%. Contrariamente a esto, en la zona de intrusión marina se ve un aumento del 8% alcanzando así un 11% total, sin embargo, este volumen disminuye inmediatamente al entrar en contacto con el agua dulce del acuífero producto de la mezcla producida en esta zona.

En el caso del yeso y la calcita se observa un aumento en la capacidad de precipitar estos minerales a una mayor porosidad inicial.

Con respecto al cuarzo, al feldespató potásico y, a la albita, no se tienen variaciones en el periodo de tiempo simulado lo cual era de esperar dada la baja tasa de disolución de estos minerales en las condiciones modeladas.

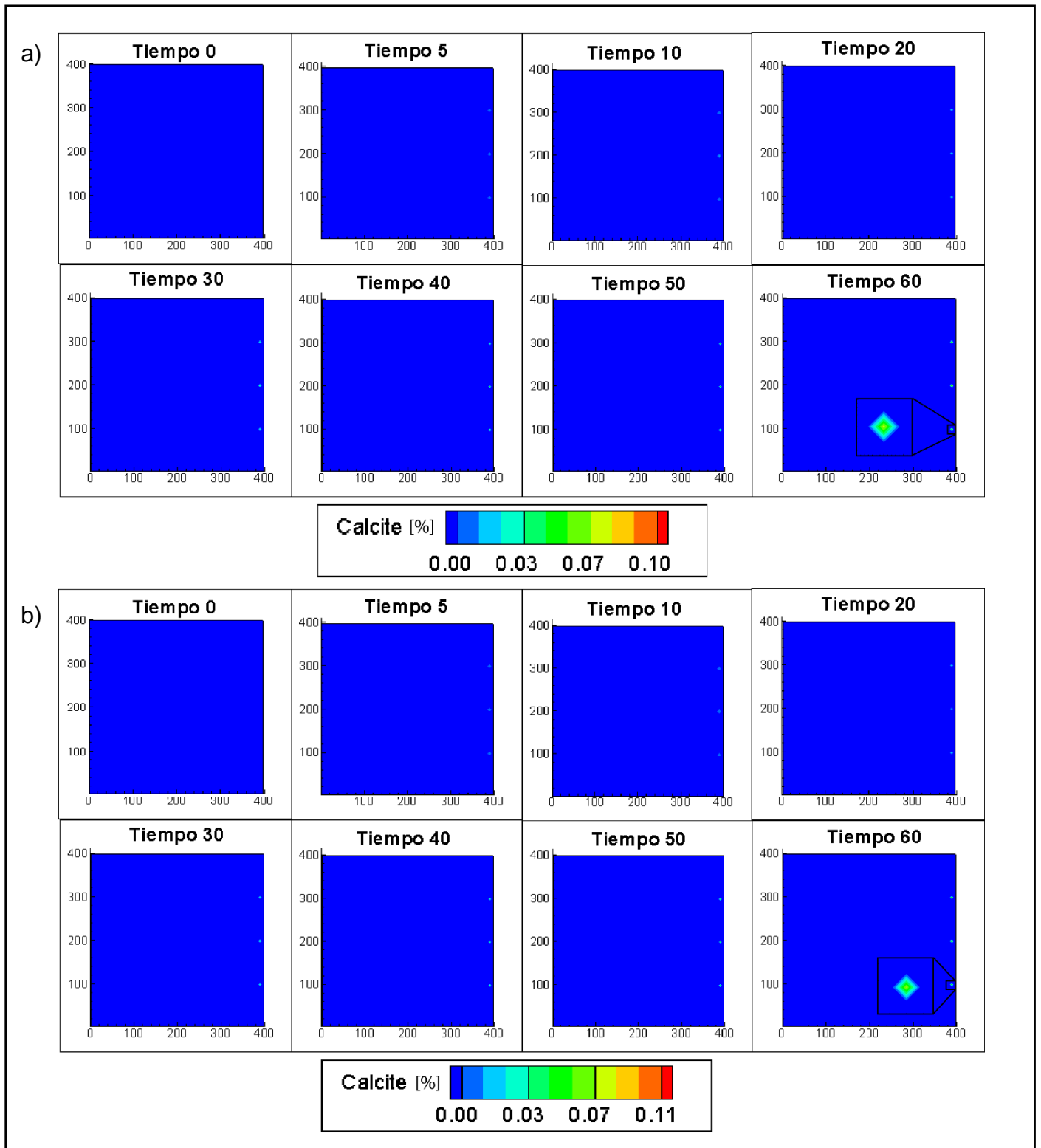


Figura 4.14 Evolución de mineralogía primaria: a) Calcita (12% porosidad inicial); b) Calcita (19% porosidad inicial). Se observa un zoom de una de las celdas con concentración máxima a los 60 años. Fuente: elaboración propia.

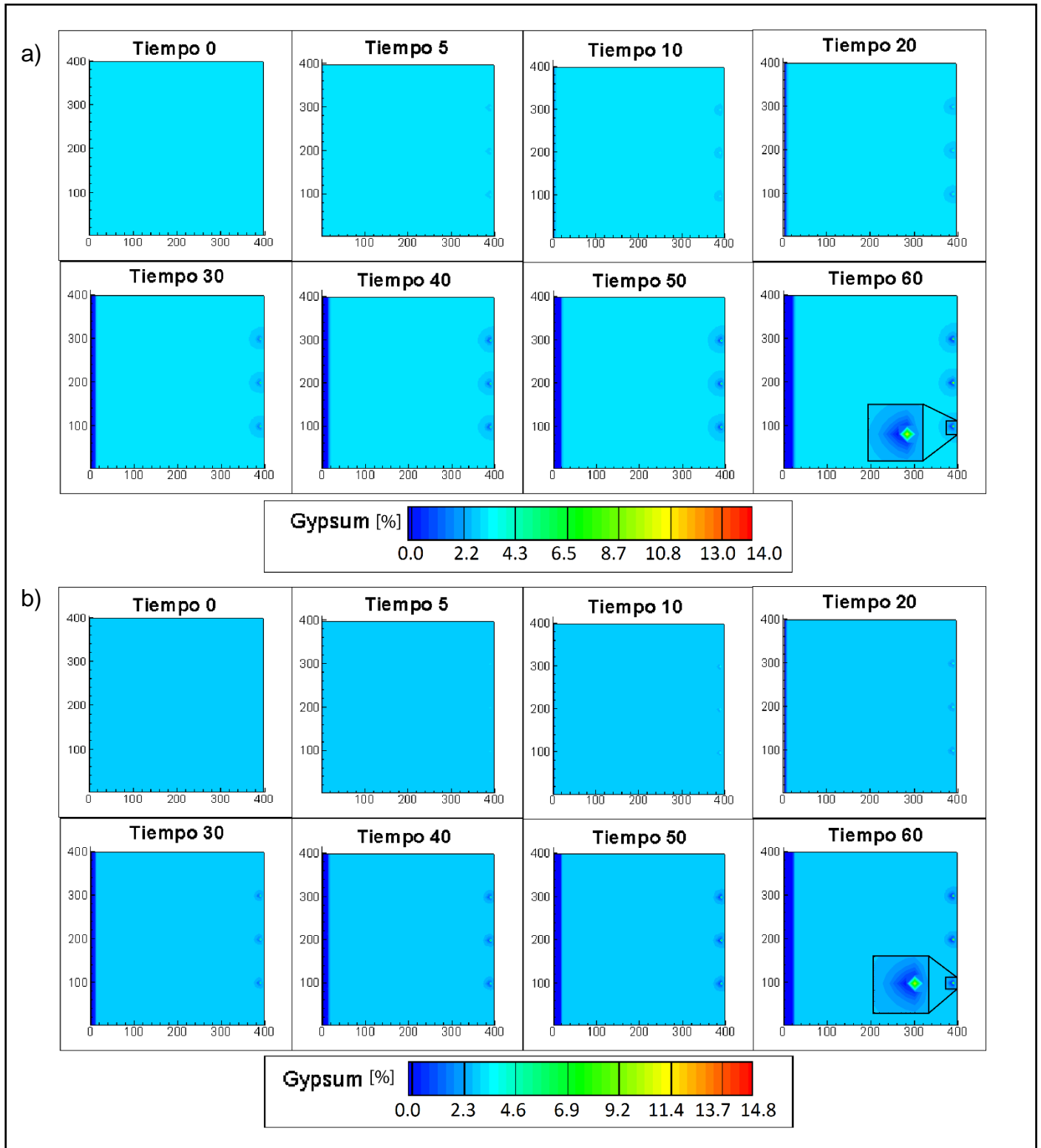


Figura 4.15 Evolución de mineralogía primaria: a) Yeso (12% porosidad inicial); b) Yeso (19% porosidad inicial). Se observa un zoom de una de las celdas con concentración máxima a los 60 años. Fuente: elaboración propia.

4.2.3 Porosidad y pH

Respecto a la porosidad (figura 4.16) se ve que esta aumenta hasta un 3% en los primeros 25 metros de entrada del flujo de agua dulce, además de aumentar paulatinamente en la zona de intrusión marina. Esto se relaciona con aquellos sectores donde el volumen de yeso aumenta (disminuyendo la porosidad) o disminuye (aumentando la porosidad), considerándose este mineral como dominante en la evolución de la porosidad dentro del sistema.

En cuanto al pH (Figura 4.17) se observa que no existen grandes variaciones con la intrusión marina aumentando levemente en 0,02 unidades tanto en el escenario de 12% como de 19% de porosidad inicial, esto último se debe a los pequeños porcentajes de intrusión marina en el sistema considerado.

Estos parámetros no presentan variaciones entre el escenario de 12% y 19% de porosidad inicial.

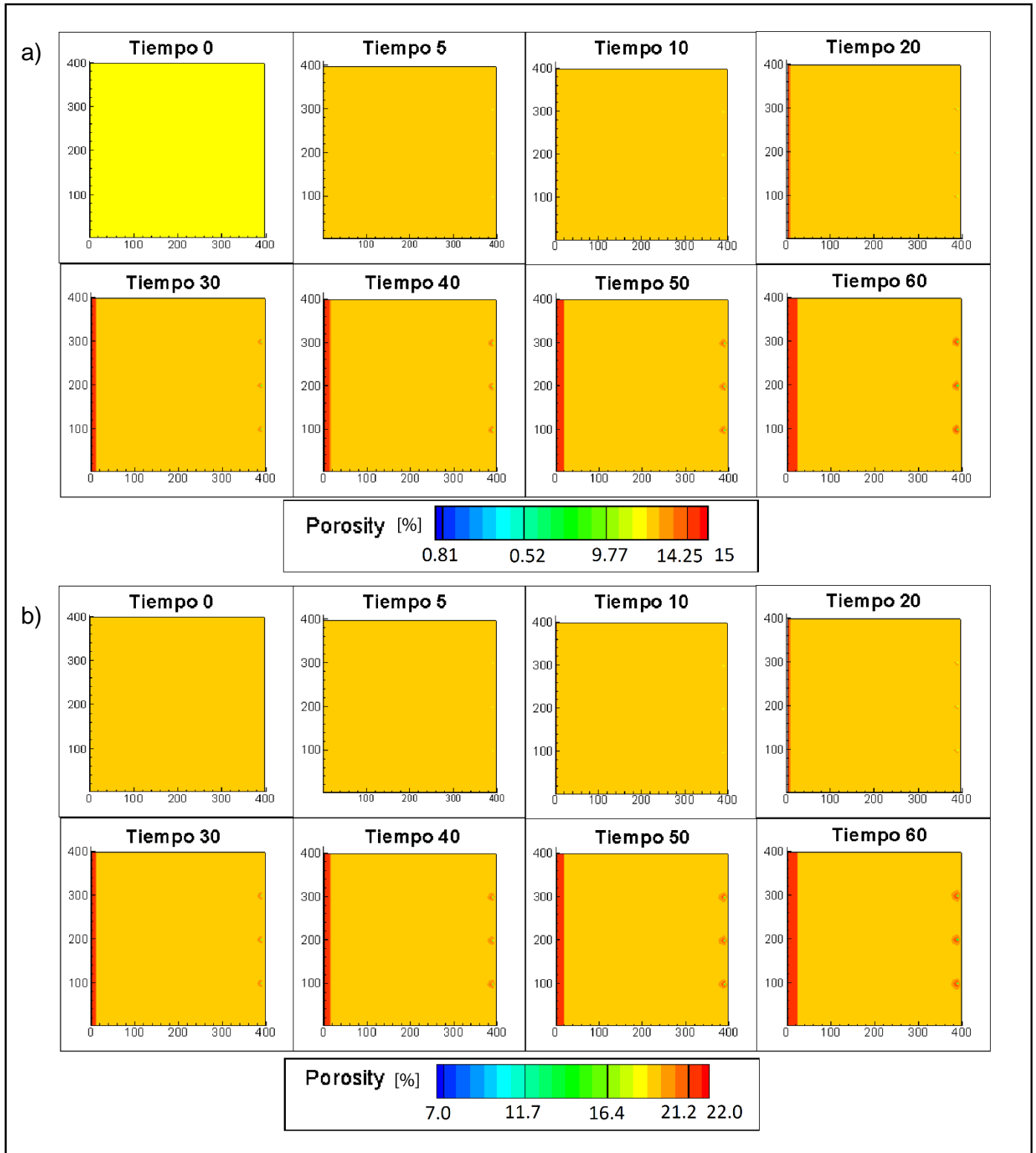


Figura 4.16 Evolución la porosidad: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial.
Fuente: elaboración propia.

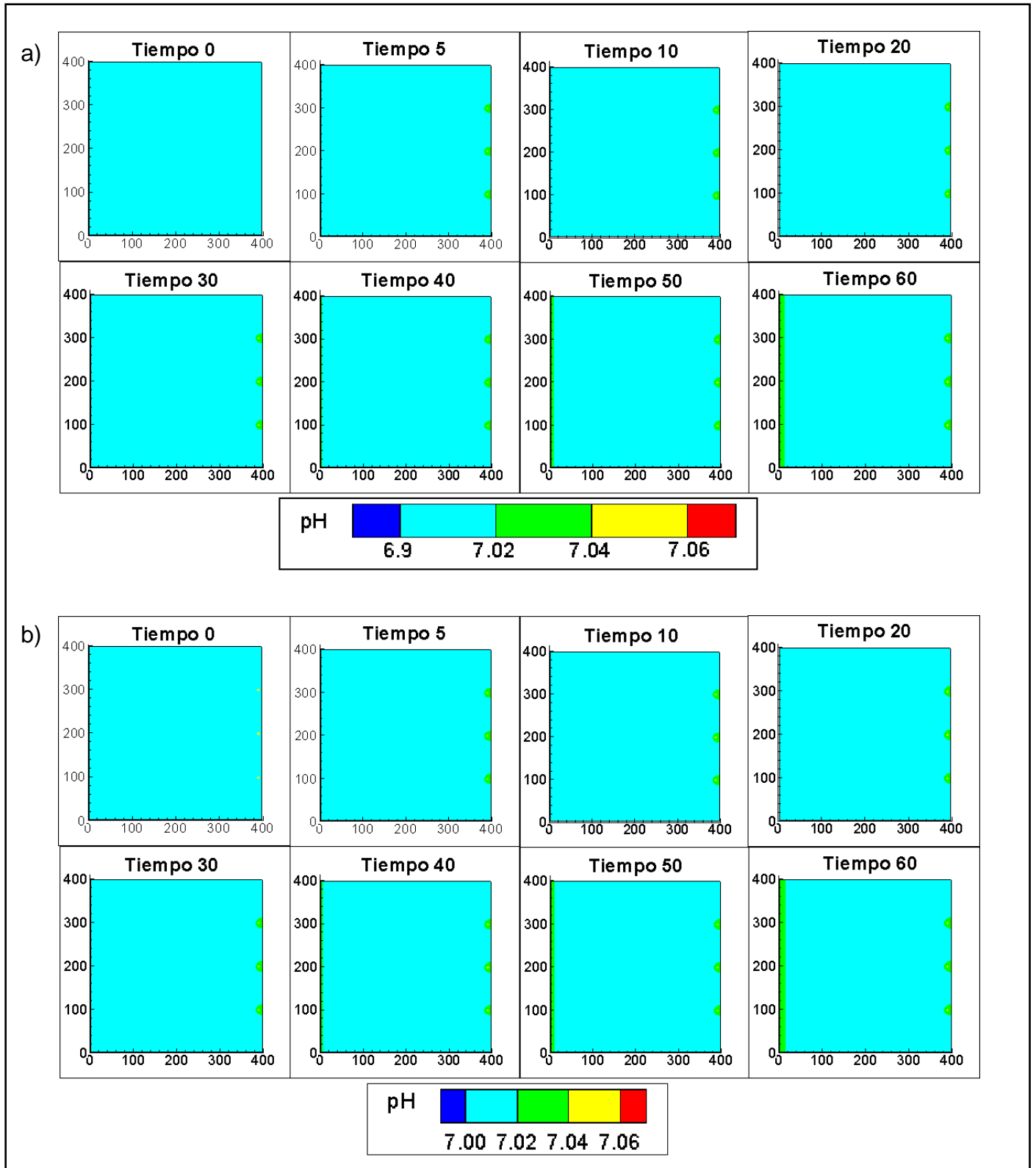


Figura 4.17 Evolución del pH: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial.
Fuente: elaboración propia.

4.3 Evolución del modelo de transporte reactivo de contaminantes orgánicos en un acuífero salinizado

Para el modelo de contaminación por BTEX en un acuífero costero salinizado también se varía la porosidad inicial, modelando un escenario con 12% y otro con un 19%. Las variables de interés (mineralogía primaria, secundaria, pH, porosidad y especies primarias) se plotean en 8 periodos de tiempo (0, 5, 10, 20, 30, 40, 50 y 60 años).

4.3.1 Evolución en la geoquímica de las aguas

Las figuras de 4.18 a 4.24 presentan la evolución de los elementos químicos en el acuífero en los años simulados, además, se ve su comparación con el escenario de 19% de porosidad inicial.

La evolución del ácido acético y del benceno (Figuras 4.18 y 4.19) es similar. Ambos presentan un aumento de las concentraciones ligado al punto de entrada del contaminante. Estas concentraciones descienden alejándose de dicha zona en el sentido del flujo principal. Se observa, de hecho, que la pluma del benceno y del ácido acético se desplaza siendo transportados en dirección del flujo, mostrando además un frente de avance de 60 metros en dirección contraria al flujo.

El Cl⁻ y el Na⁺ (Figuras 4.20 y 4.21) presentan una evolución similar. Se observa un mayor aumento en las concentraciones de estos elementos aportados por la intrusión, sin embargo, el agua contaminada por ácido acético y benceno también aportan cierta cantidad de estos iones. El frente alcanzado en dirección contraria del flujo por los contaminantes orgánicos es de 20 metros para el Cl⁻ y 40 para el Na⁺. Existe, además, un desplazamiento vertical que afecta unos 130 metros bajo el punto de entrada inicial.

El aumento de concentración de Mg²⁺ (Figura 4.22) es mayor en la zona de entrada de contaminantes orgánicos alcanzando 0,26 mol/kgw, mientras que, en la zonas directamente afectadas por intrusión marina solo alcanza los 0,11 mol/kgw. Se observa que la mayor concentración se encuentra en el punto de contaminación y disminuye alejándose de éste. Este desplazamiento afecta 50 metros en dirección contraria al flujo y 170 metros en el eje vertical.

El Ca²⁺ y el SO₄²⁻ (Figura 4.23 y 4.24) presentan comportamientos similares aumentando sus concentraciones de manera constante y similar tanto en las celdas de entrada de contaminantes orgánicos como en los de intrusión marina. Se observa un desplazamiento contrario a la dirección de flujo de 80 metros en el caso del SO₄²⁻ y 50 en el caso del Ca²⁺. Se identifica una disminución en las concentraciones relacionada al frente donde ingresa el flujo de agua dulce del acuífero.

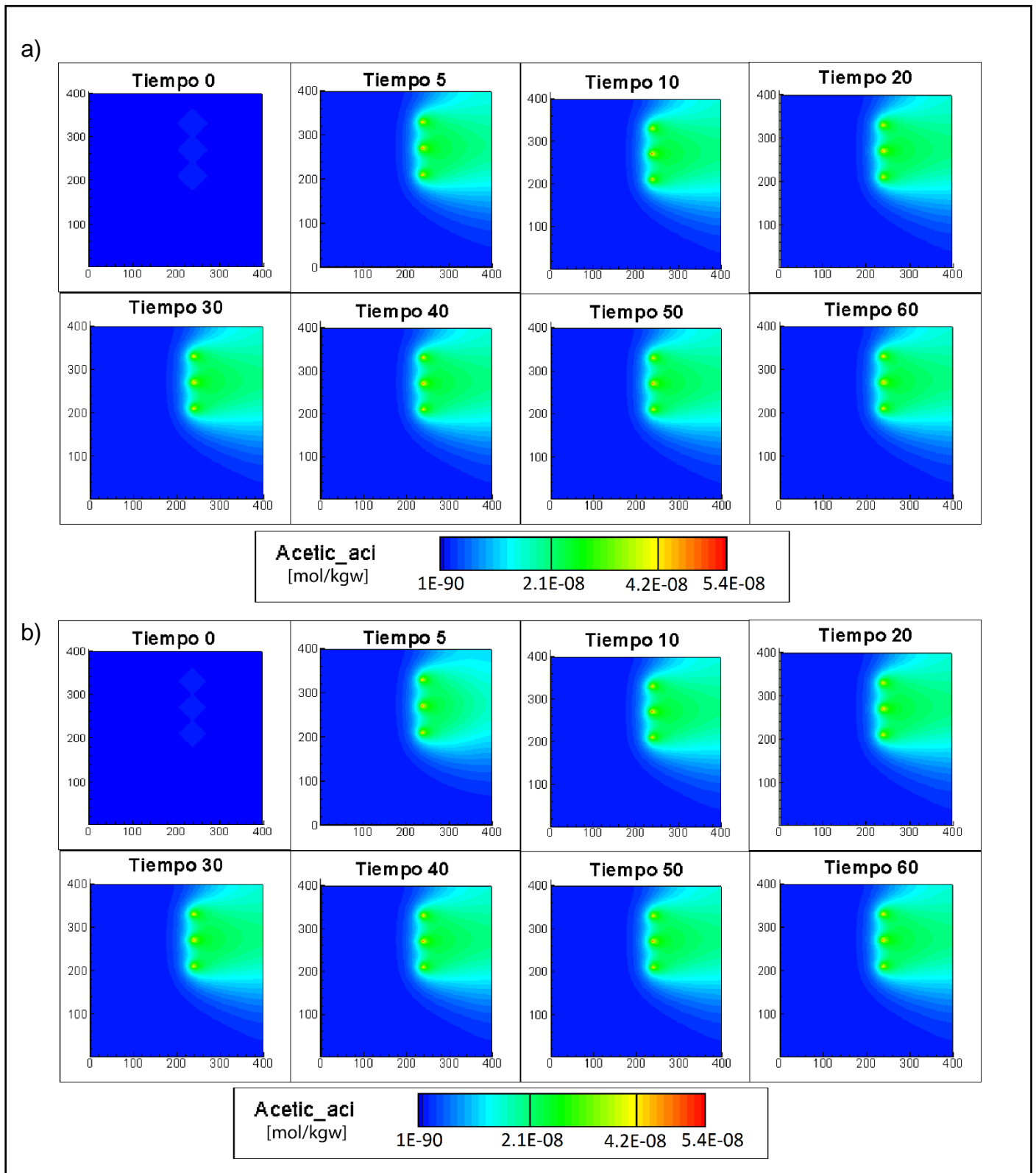


Figura 4.18 Evolución del ácido acético: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial. Fuente: elaboración propia.

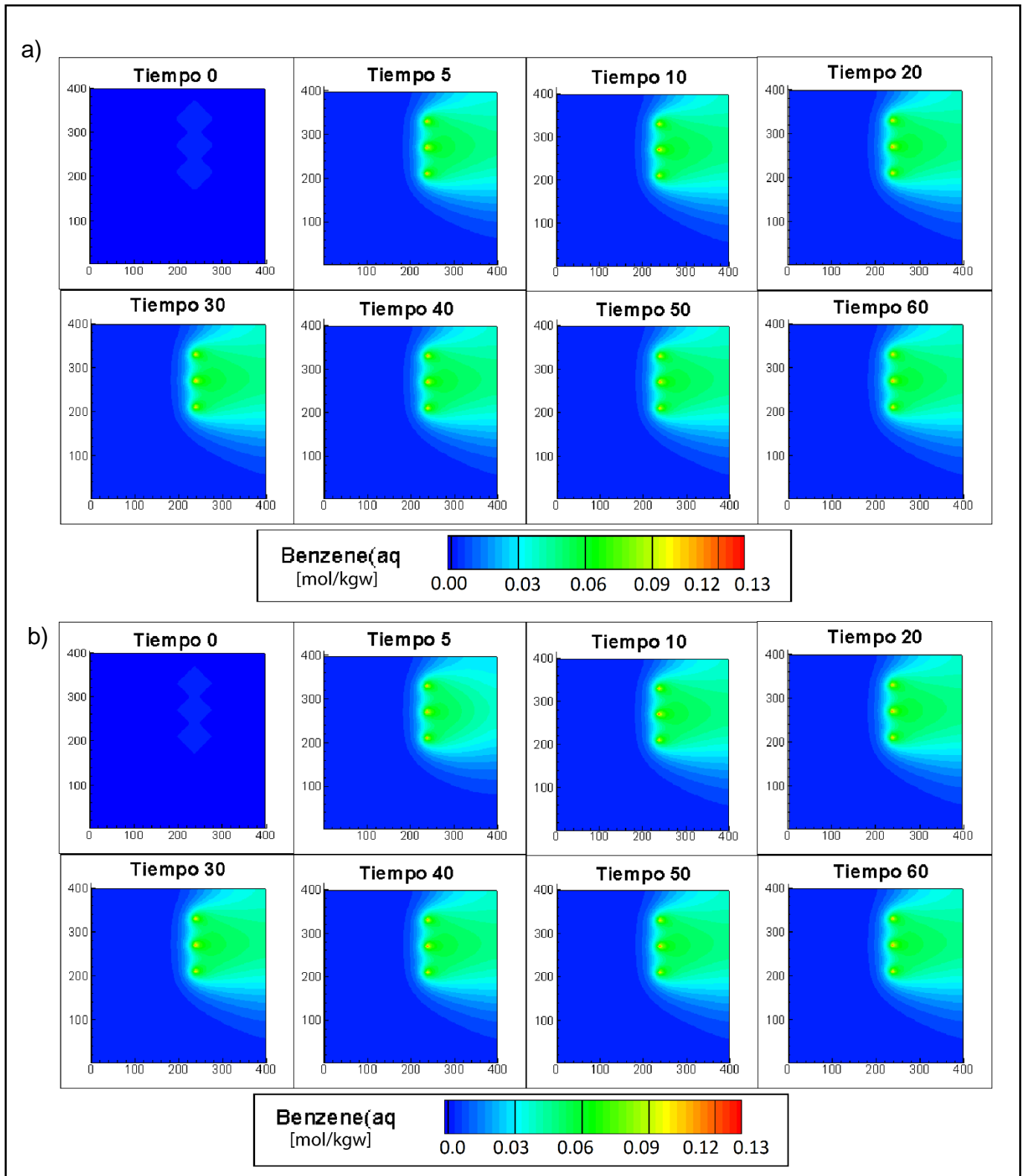


Figura 4.19 Evolución del benceno: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial.
Fuente: elaboración propia.

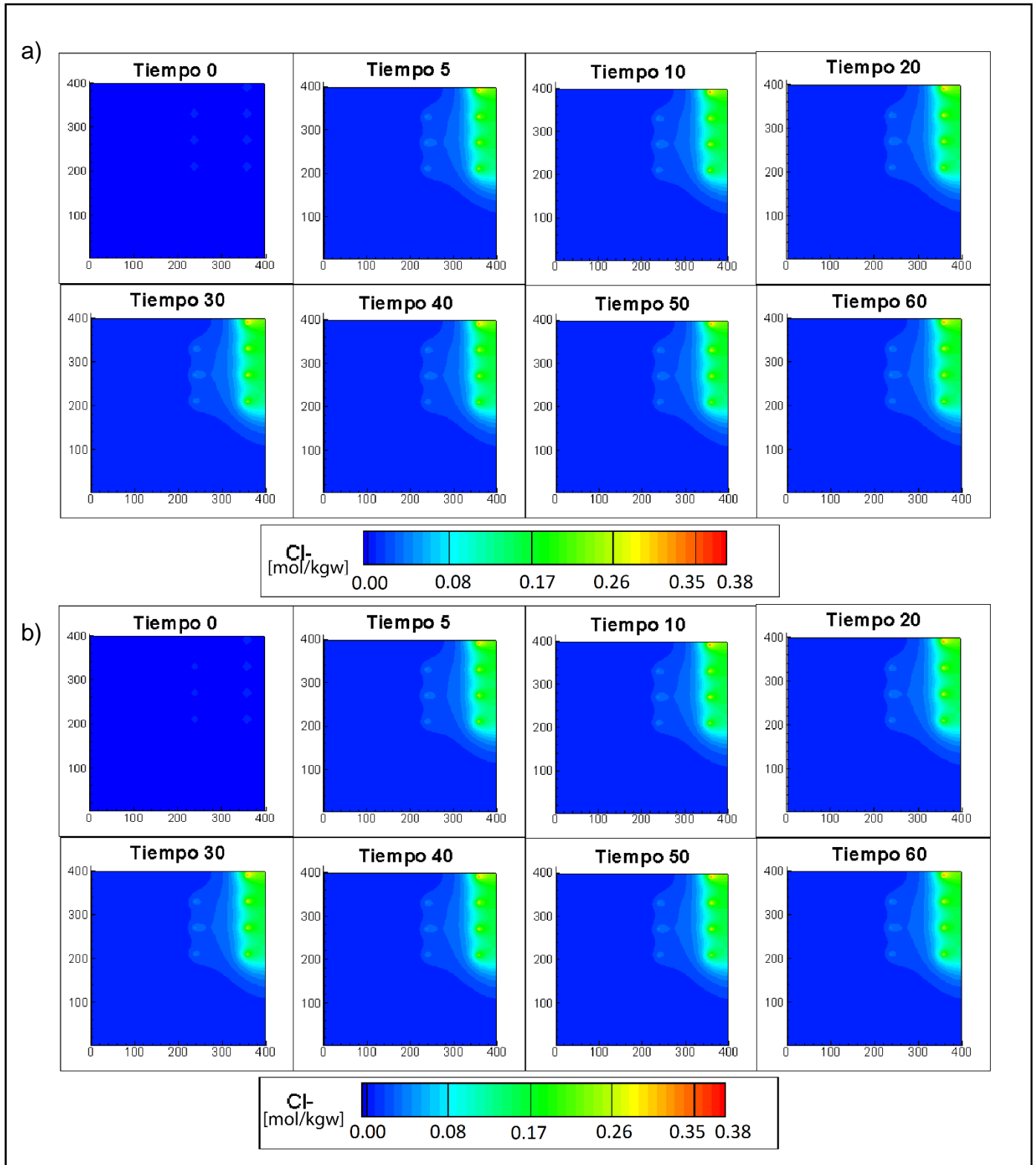


Figura 4.20 Evolución de especies primarias: a) Cl- (12% porosidad inicial); b) Cl-(19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

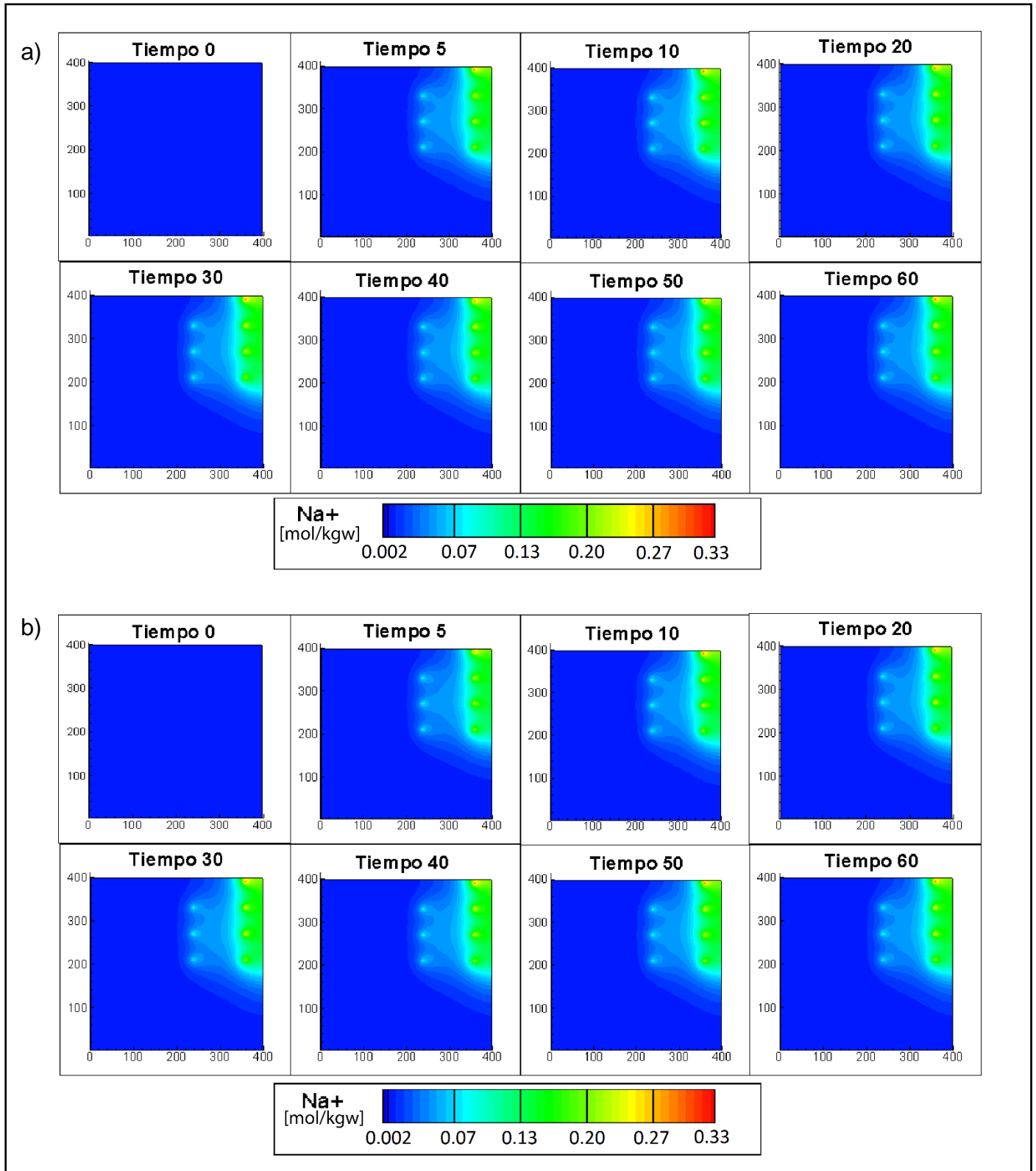


Figura 4.21 Evolución de especies primarias: a) Na⁺ (12% porosidad inicial); b) Na⁺(19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

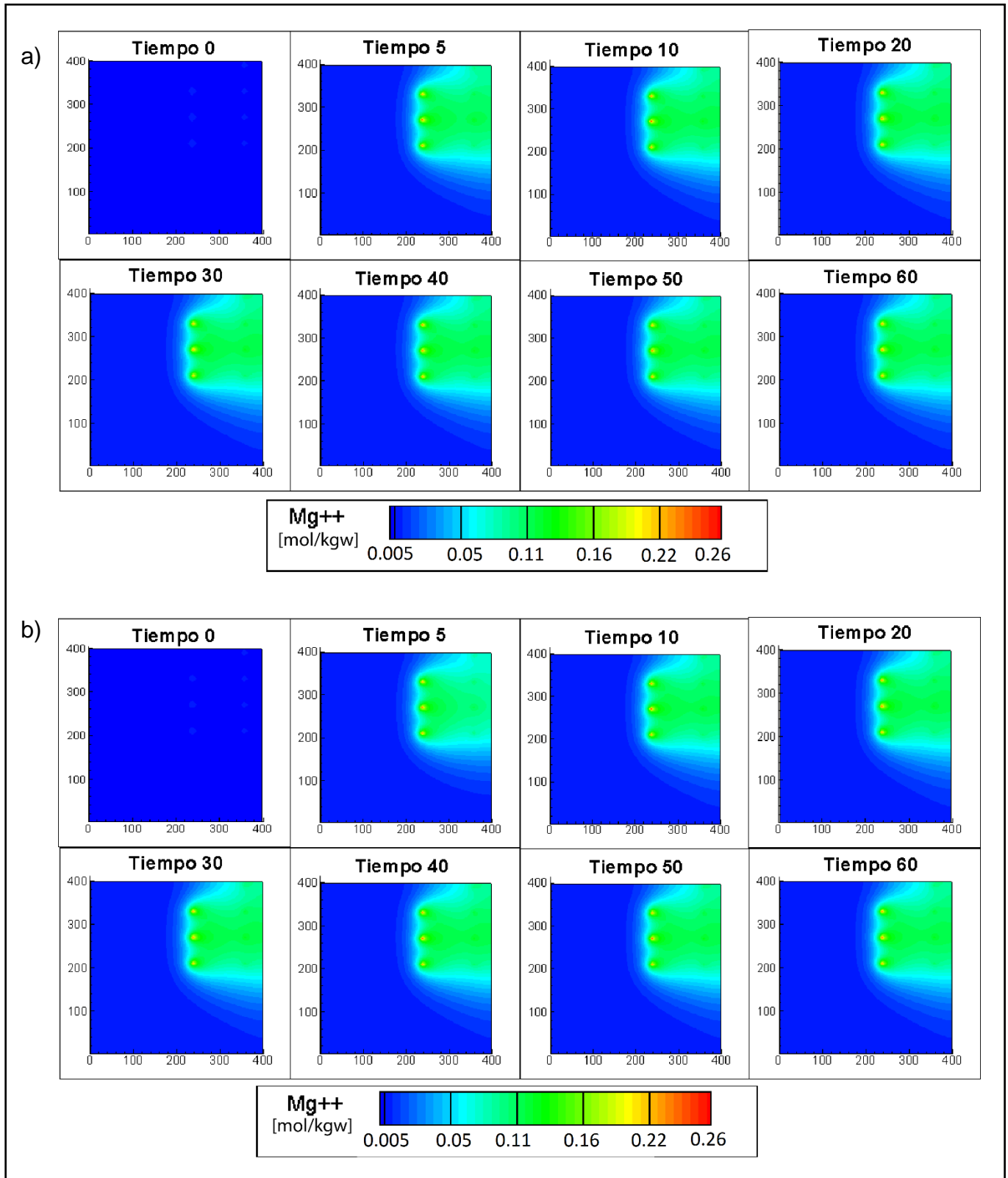


Figura 4.22 Evolución de especies primarias: a) Mg^{2+} (12% porosidad inicial); b) Mg^{2+} (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

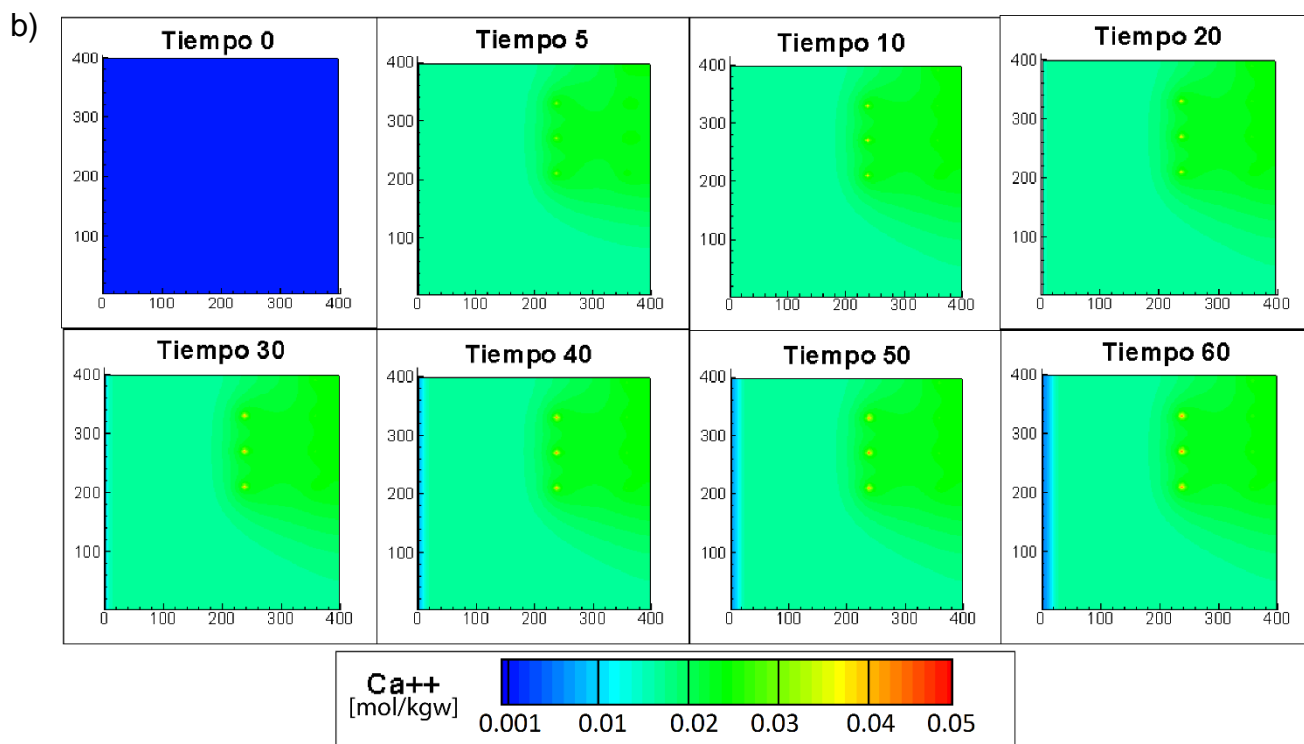
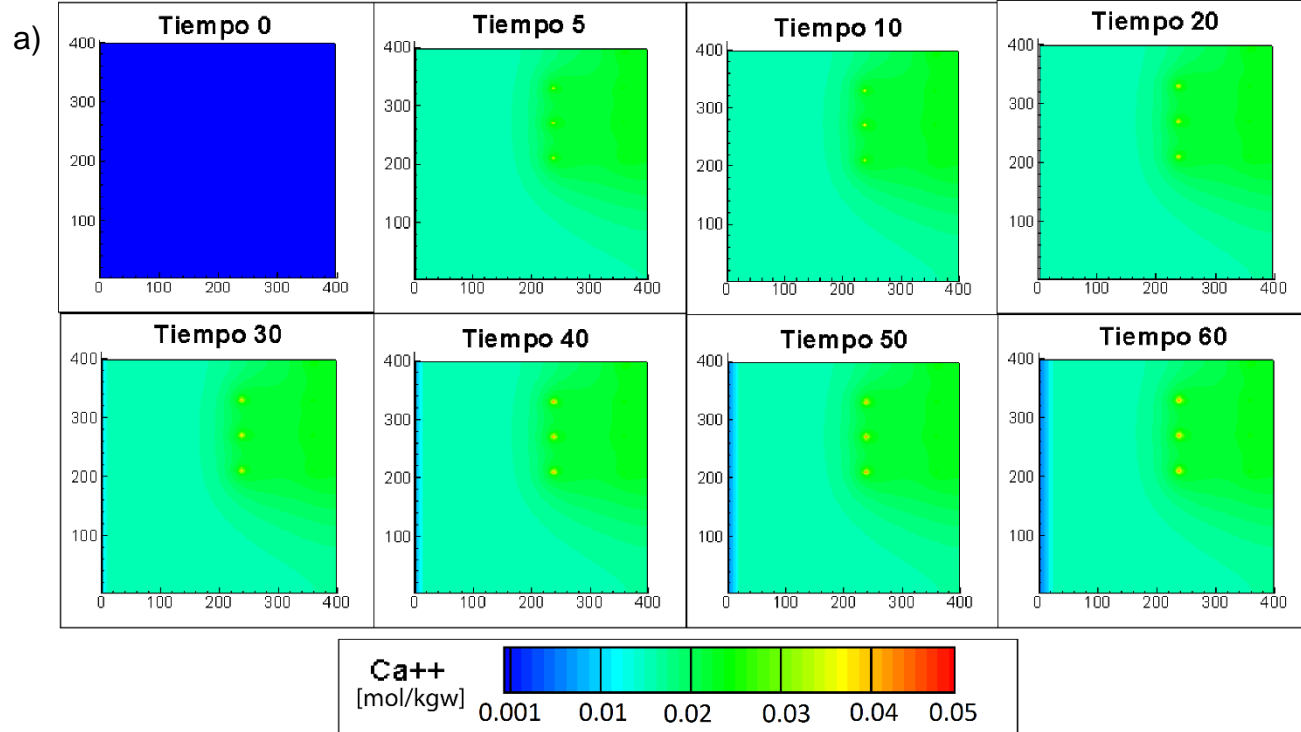


Figura 4.23 Evolución de especies primarias: a) Ca^{2+} (12% porosidad inicial); b) Ca^{2+} (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

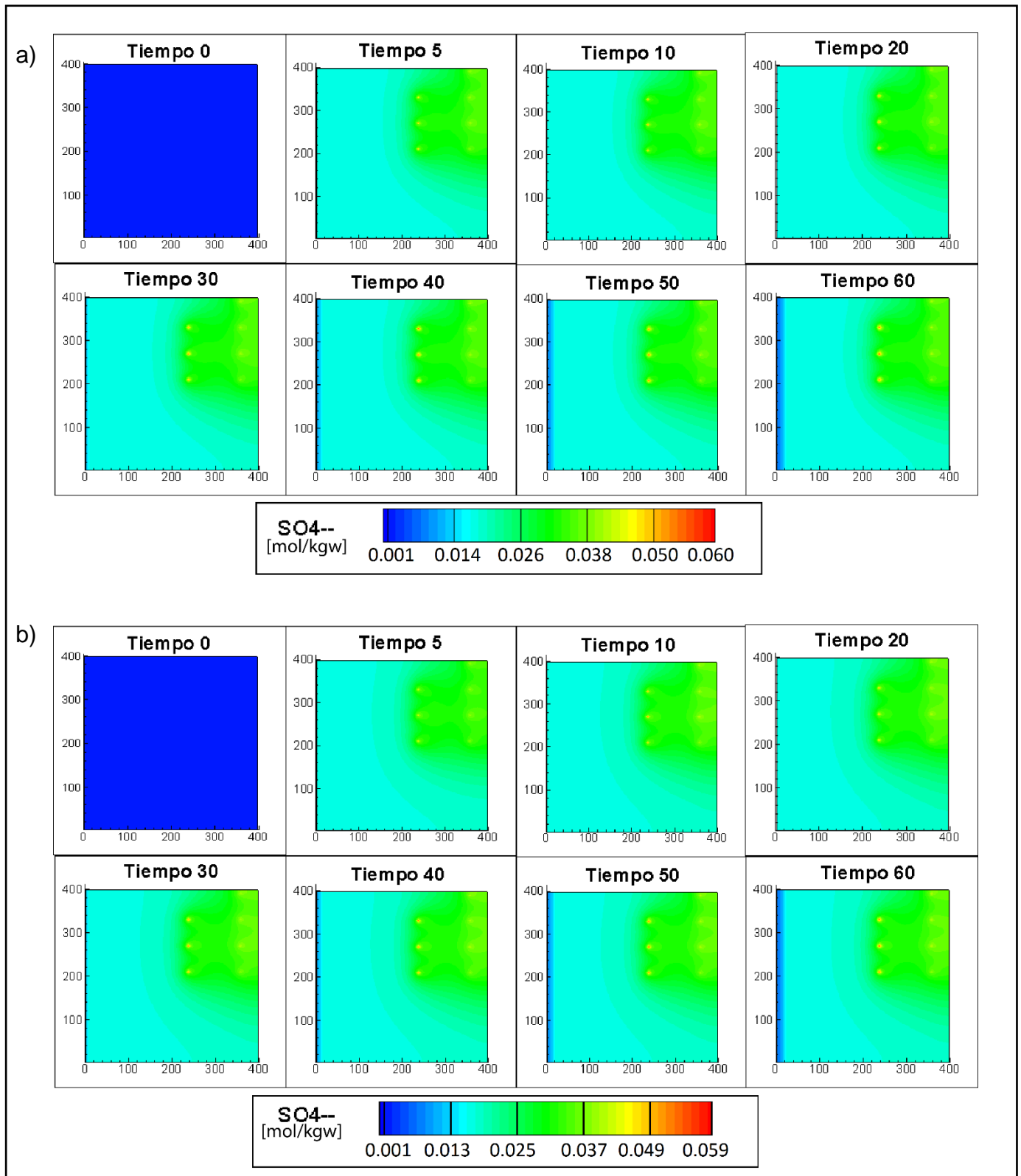


Figura 4.24 Evolución de especies primarias: a) SO_4^{2-} (12% porosidad inicial); b) SO_4^{2-} (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia

En la figura 4.25 se observa un gráfico multi – elemento donde se puede ver el comportamiento de los distintos iones y el pH en la celda (300, 200). Al igual que en el modelo de intrusión se ve una estabilización tanto en las concentraciones como en el pH con el pasar de los años alcanzando un equilibrio relativo para las especies primarias a los 5 - 6 años de simulación. Esto sucede en ambos modelos, es decir, 12% y 19% de porosidad inicial (Figura 4.26). Nuevamente existen diferencias en el tiempo que le toma a las especies alcanzar el equilibrio dependiendo de la porosidad inicial.

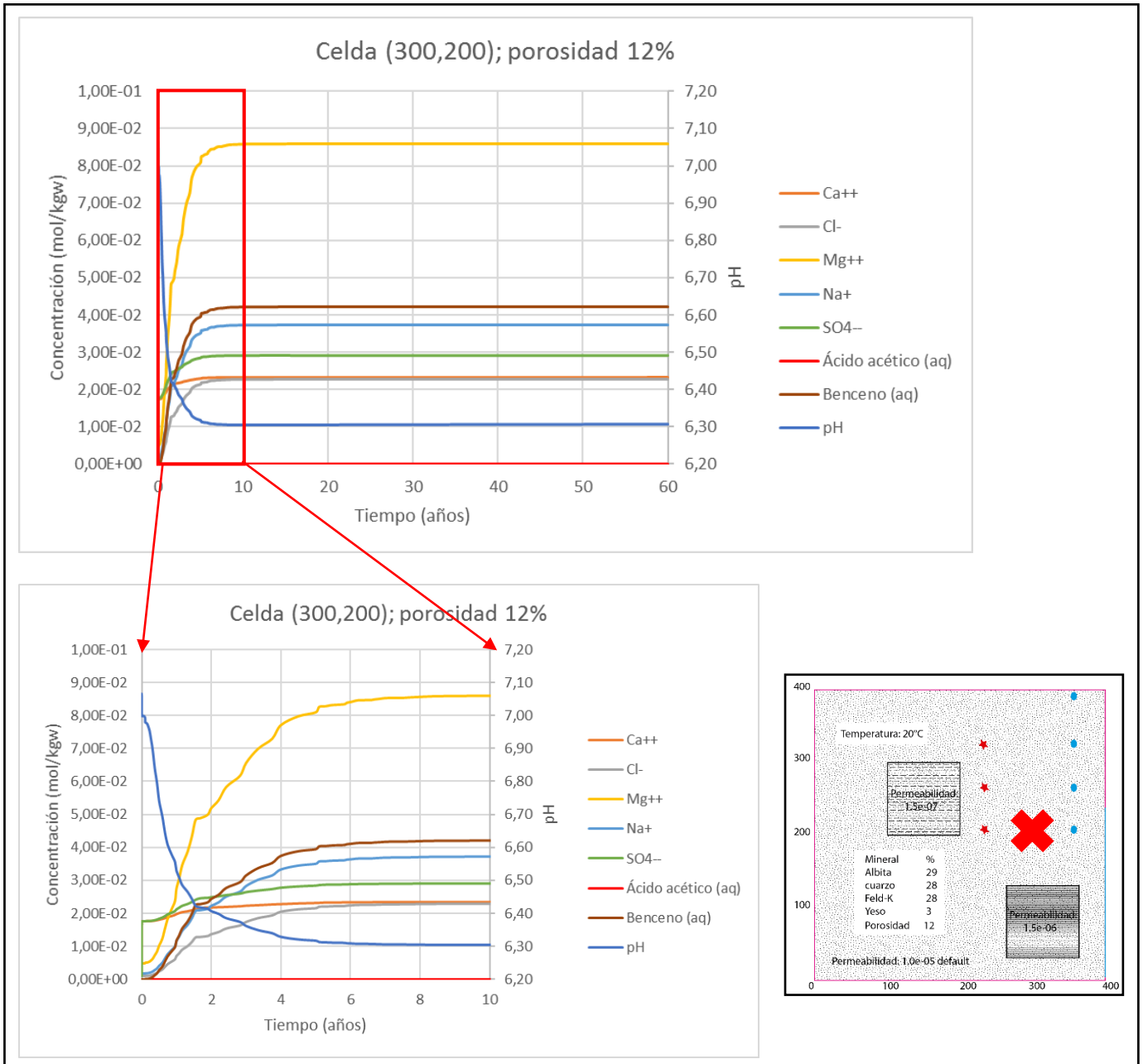


Figura 4.25 Gráfico multi – elemento en la celda 240,200 para el caso de contaminación orgánica en un acuífero costero salinizado – 12% porosidad inicial. En la parte inferior se observa un zoom de la zona roja. Se observa, además, un esquema de la ubicación de la celda dentro del modelo. Fuente: elaboración propia.

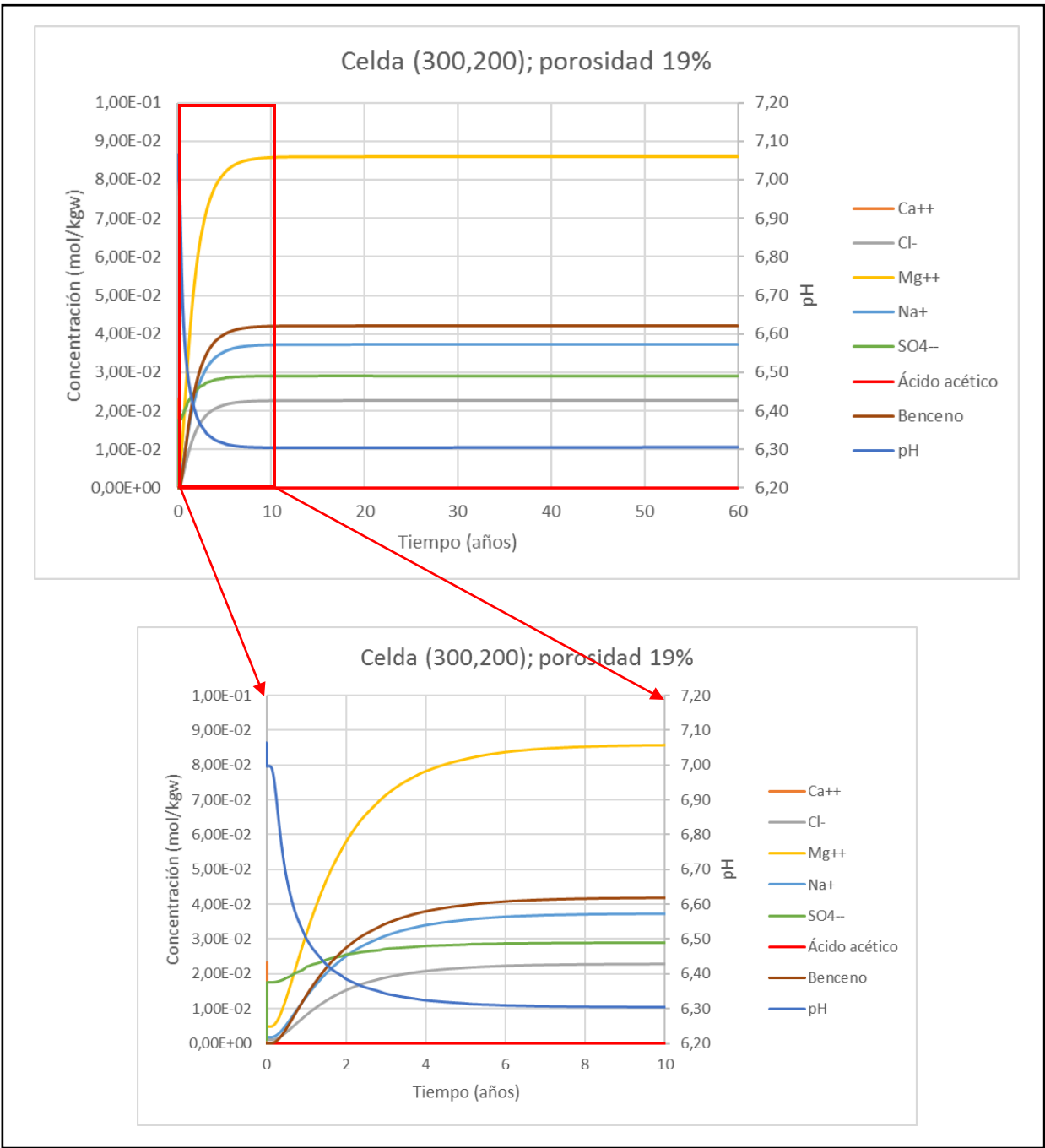


Figura 4.26 Gráfico multi – elemento en la celda 240,200 para el caso de contaminación orgánica en un acuífero costero salinizado – 19% porosidad inicial. En la parte inferior se observa un zoom de la zona roja. Fuente: elaboración propia.

4.3.2 Evolución de los minerales en la simulación

El volumen de calcita (Figura 4.27) muestra un aumento al comienzo de las simulaciones relacionado al ingreso del flujo salino y de contaminantes orgánicos. Sin embargo, con el pasar de los años se ve como la calcita se disuelve en la zona de intrusión mientras que la precipitación ocurre principalmente en un halo alrededor de la zona de entrada de los contaminantes orgánicos. Este aumento de volumen presenta un avance de 60 metros en dirección de flujo y solo 20 metros en dirección contraria a éste. Existe un aumento de 1,2% en el volumen de considerando el escenario de un 12% de porosidad inicial.

Con respecto al yeso (Figura 4.28), se puede observar un volumen máximo del 15% a los 60 años de simulación relacionado con la precipitación de este mineral en las zonas de entrada del contaminante orgánico. Por otro lado, se observa una disminución del volumen de este mineral a medida que entra el flujo de agua dulce presente en el acuífero que claramente al estar subsaturada tiene la capacidad de disolver el yeso alcanzando un frente de disolución de 20 metros. Al igual que en el caso de la calcita, las mayores variaciones de este mineral se encuentran asociadas a las celdas donde ocurre el ingreso de contaminantes orgánicos presentando una precipitación de un 12% en el escenario de 12% y 18% en el escenario de 19% de porosidad inicial alcanzando volúmenes de 15% y 21%, respectivamente. Se observa, además, que en torno a estas celdas existe una disolución de este mineral afectando una zona de 30 metros en contra de la dirección de flujo y 20 metros en dirección de este. Se observa una menor importancia del aporte producido por la intrusión marina lo cual se explica por la diferencia de magnitud en las entradas de ambos flujos. La mayor variación se da directamente sobre los puntos de ingreso donde se disuelve a medida que se aleja de estos.

En cuanto a la albita y cuarzo no se ven variaciones significativas en el transcurso de tiempo modelado debido a su baja tasa de reacción.

En el caso del feldespató potásico (Figura 4.29), si bien las variaciones no superan un 0,0001% en 30 años, las zonas en que se produce la precipitación y disolución son particulares. La disolución se centra en aquellas zonas cercanas a la entrada de contaminantes orgánicos, mientras que, la precipitación se encuentra en puntos donde existe una entrada de la intrusión marina.

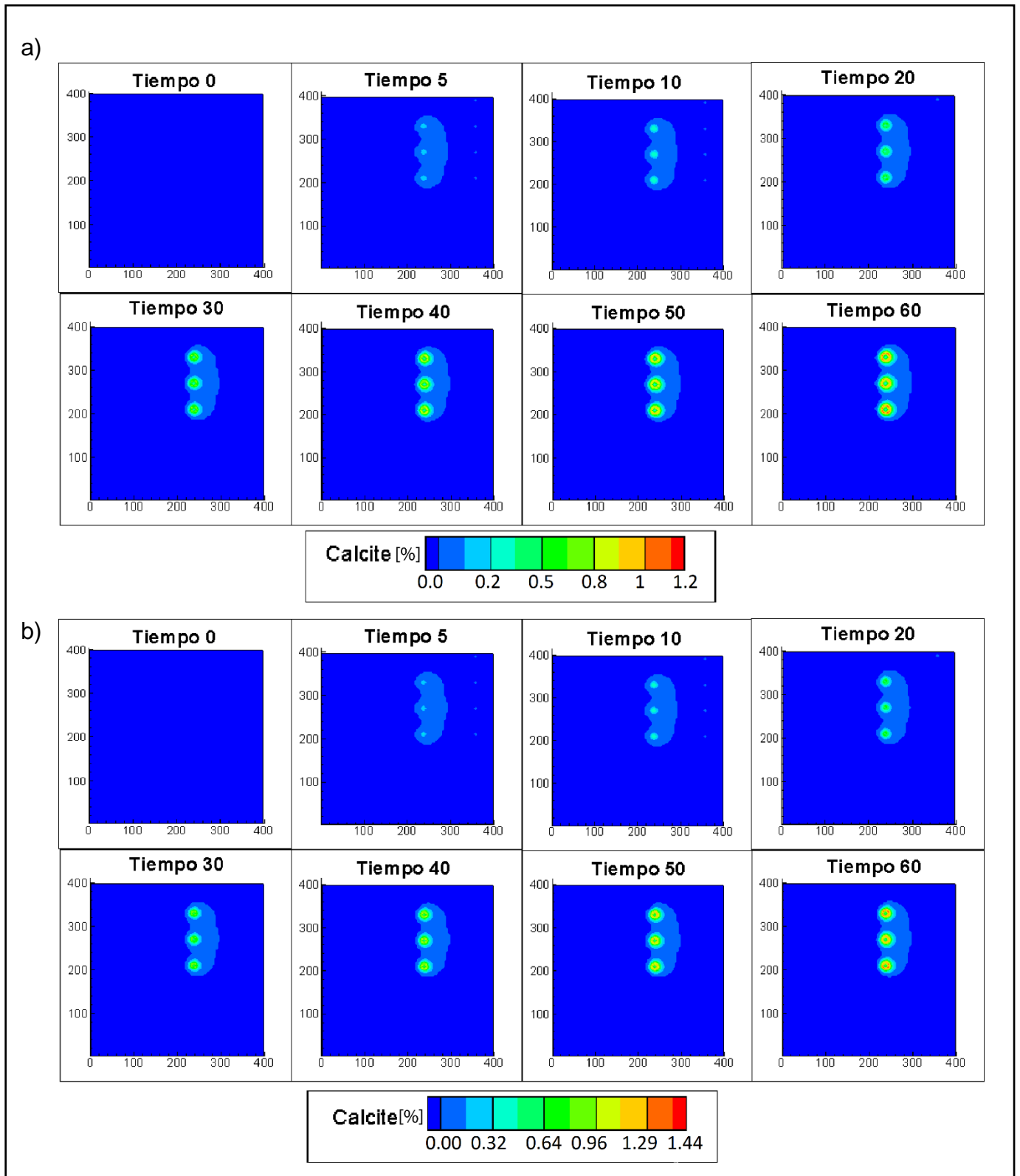


Figura 4.27 Evolución de mineralogía primaria: a) Calcita (12% porosidad inicial); b) Calcita (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

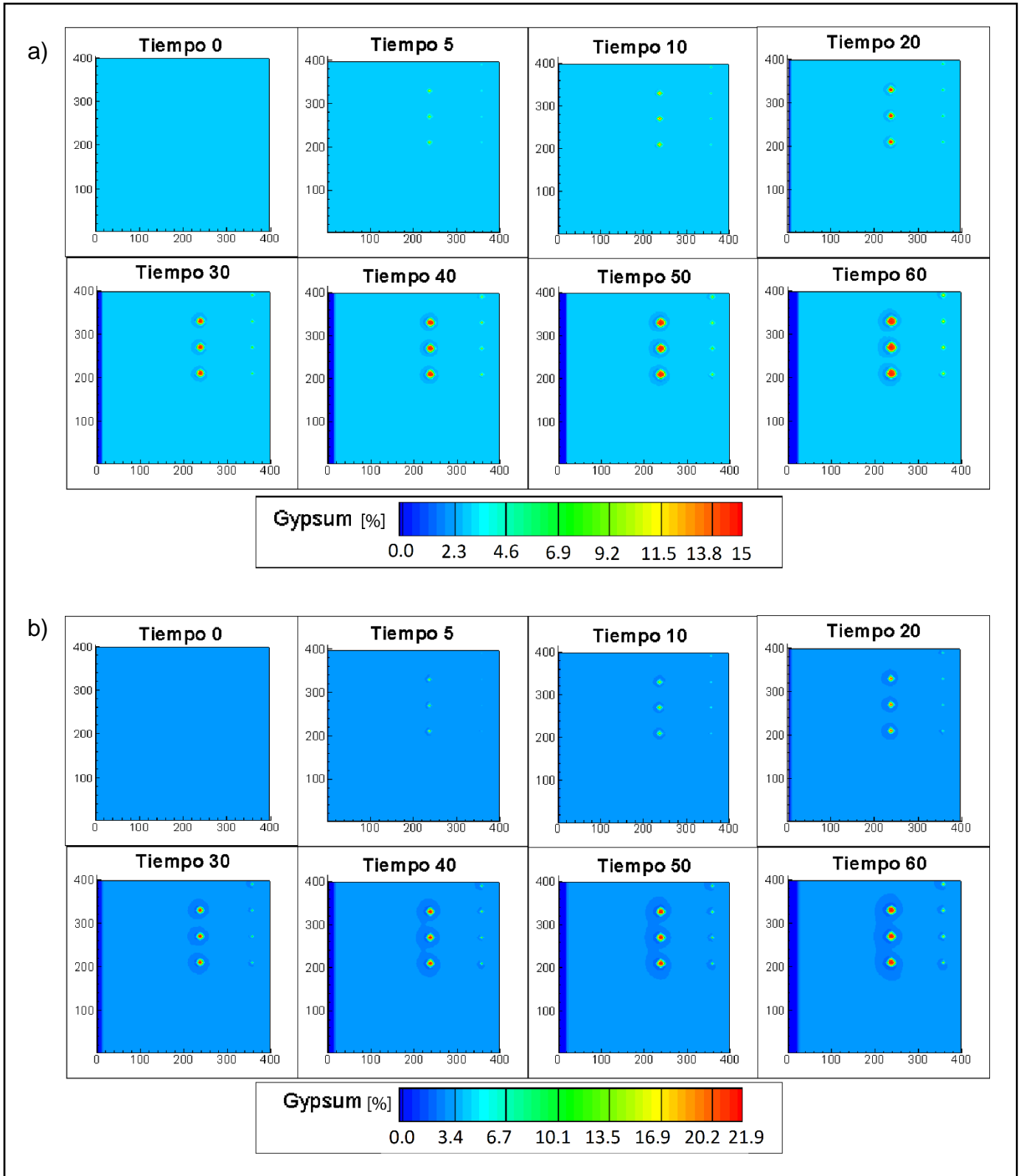


Figura 4.28 Evolución de mineralogía primaria: a) Yeso (12% porosidad inicial); b) Yeso (19% porosidad inicial). Fuente: elaboración propia.

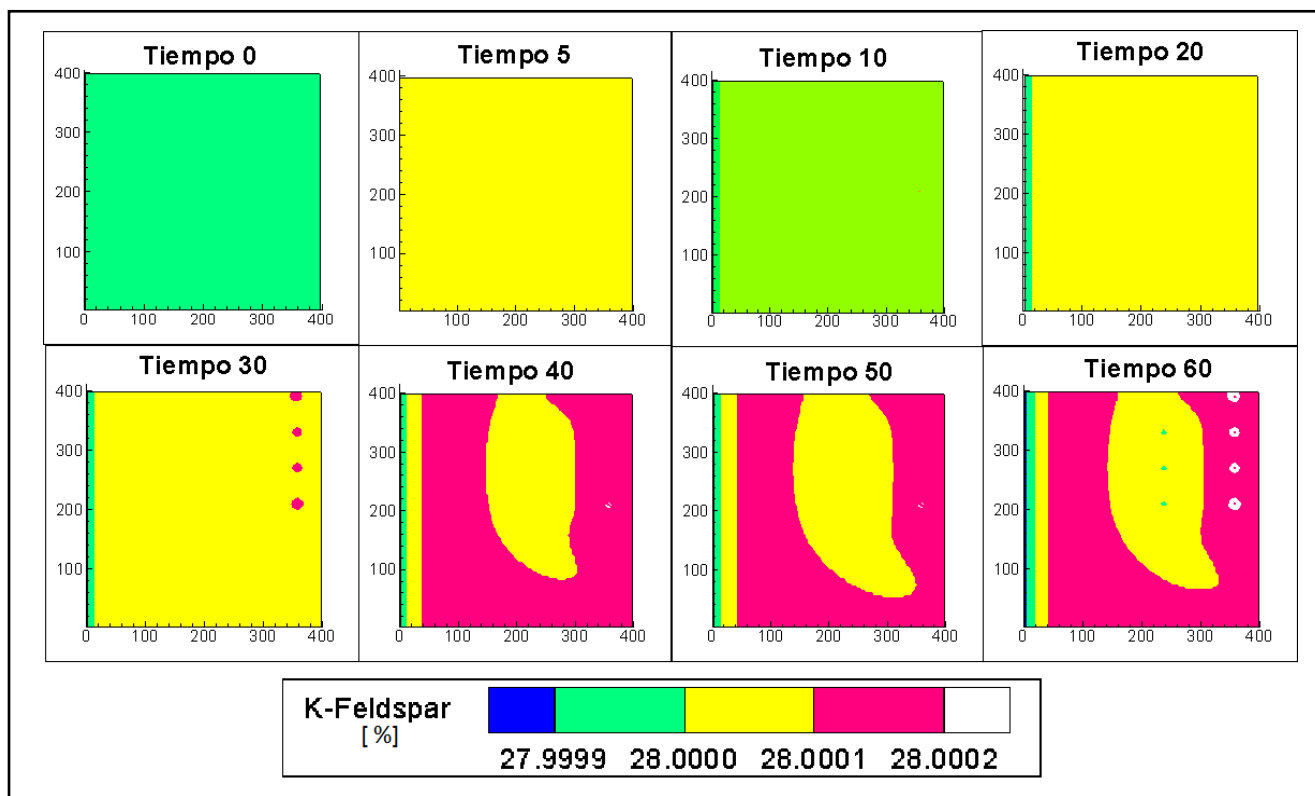


Figura 4.29 Evolución de mineralogía primaria: feldspato potásico, escenario 12% de porosidad inicial. Fuente: Elaboración propia.

4.3.3 Porosidad y pH

En la figura 4.30 se observa que el pH muestra una disminución en las zonas cercanas a las celdas donde se produce la entrada del fluido con ácido acético y benceno. La extensión de esta zona es similar al frente de avance mostrado por los componentes nombrados. A medida que las zonas se encuentran más lejanas a las celdas de entrada de contaminantes orgánicos y se mezcla con el agua del acuífero, más básicas se van haciendo.

La porosidad (Figura 4.31) se reduce hasta alcanzar casi 0% en aquellas zonas donde se produce una precipitación de yeso y, por ende, estaría ocurriendo un sellado de poros. Este proceso empieza al poco tiempo de empezar a correr el modelo encontrándose zonas con 0% de porosidad a los 20 años de simulación. Por otro lado, la porosidad aumenta un 2,99% en las zonas afectadas por disolución de yeso las cuales se encuentran en la entrada del flujo de agua dulce y, en la parte exterior de los halos producidos por la entrada del contaminante orgánico.

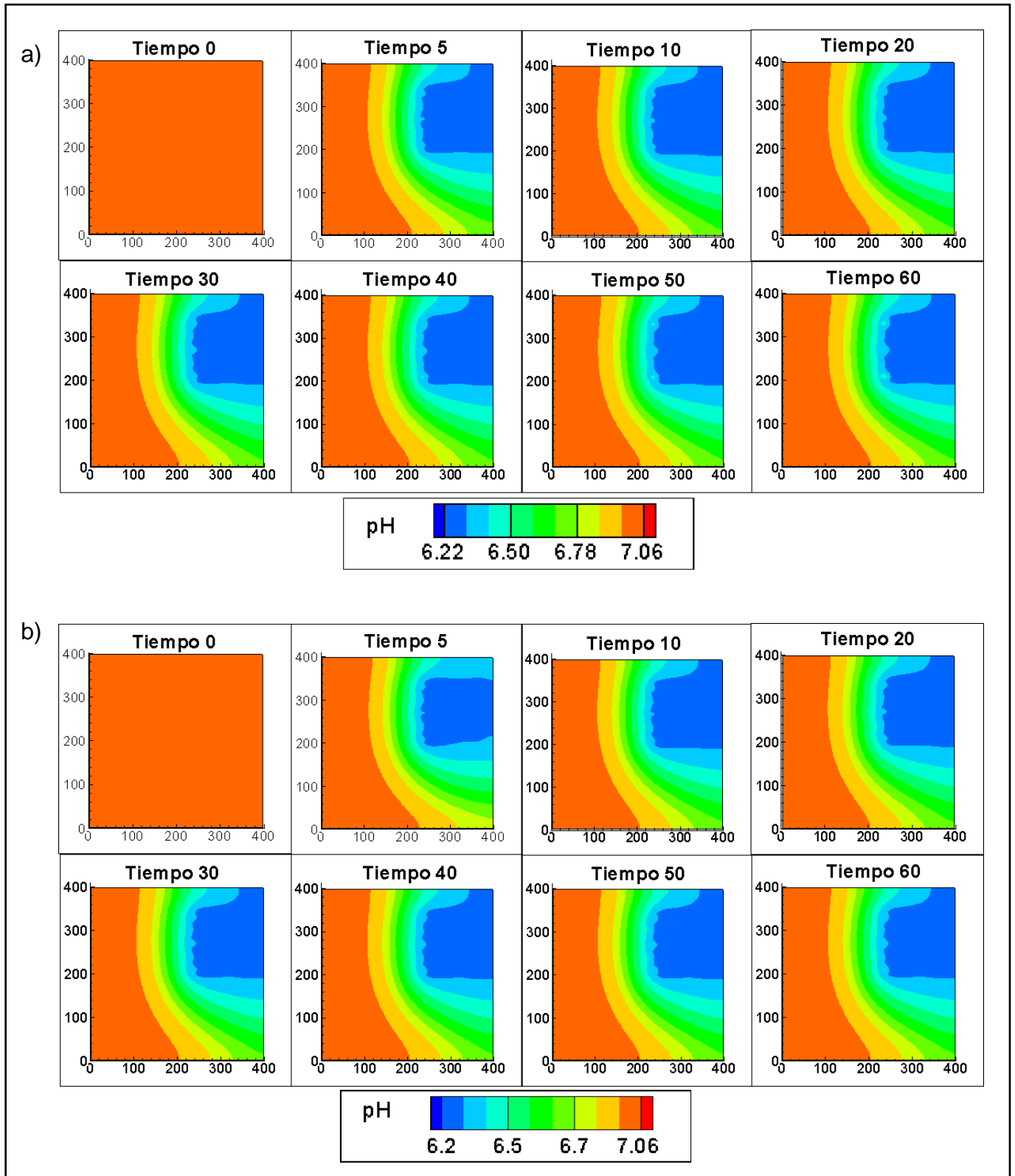


Figura 4.30 Evolución del pH: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial.
Fuente: elaboración propia.

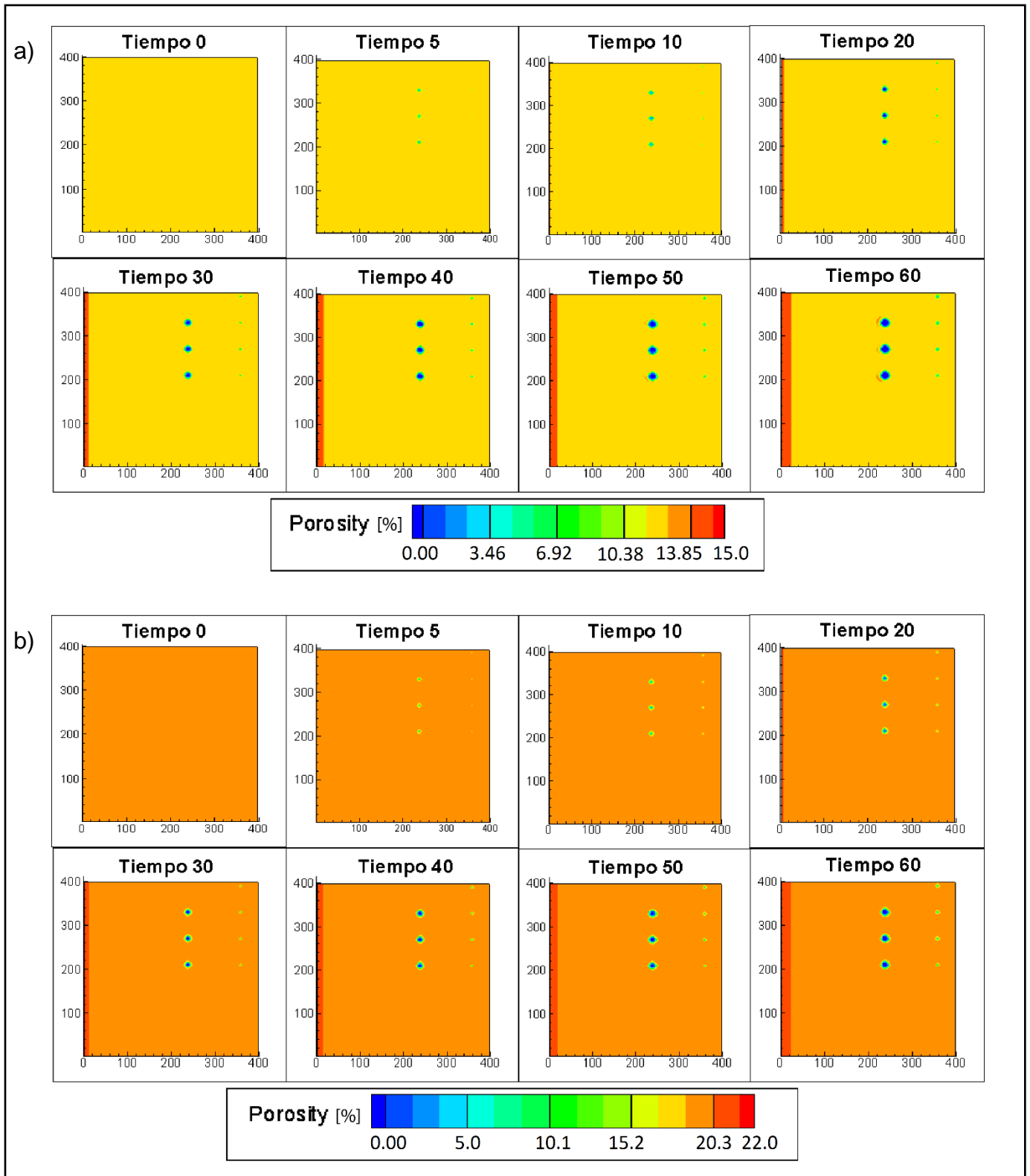


Figura 4.31 Evolución la porosidad: a) 12% porosidad inicial; b) 19% porosidad inicial.

4.4 Discusión

El modelo de intrusión marina y el de contaminación por BTEX en un acuífero costero salinizado presentan diferencias y similitudes entre sí. Además, la variación de la porosidad inicial los puede afectar de distintas maneras.

Con respecto a la porosidad inicial se puede apreciar que, en ambos modelos, para el caso del Cl^- , Na^+ y Mg^{2+} las concentraciones máximas alcanzadas en la simulación son iguales, independientemente de la porosidad inicial que presenta el sistema. Al contrario, para el caso del SO_4^{2-} y Ca^{2+} se observa una disminución de las concentraciones máximas y mínimas alcanzadas por estas especies, sin embargo, los cambios no superan los 0,002 mol/kgw para el caso del SO_4^{2-} y 0,001 mol/kgw para el caso del Ca^{2+} . Además, se observa que una porosidad inicial de 19% provoca que se alcance un equilibrio relativo de las especies presentes en el sistema en una mayor cantidad de años en comparación a una porosidad inicial de 12%. Este último factor se debe a que a una mayor porosidad en el sistema existirá una mayor mezcla de agua y, por ende, el tiempo requerido para alcanzar el equilibrio en este es mayor.

Por otro lado, respecto a la capacidad de precipitar/disolver calcita y yeso se ve que a una mayor porosidad inicial existe un aumento en la capacidad de precipitación de estos minerales para ambos modelos, pasando de un máximo de 1,2% a 1,4% en el caso de la calcita y de 15% a 22% para el yeso en modelo de contaminación orgánica con presencia de intrusión salina para una porosidad inicial de 12% y 19%, respectivamente.

La porosidad máxima alcanzada en los sistemas varía un 3% con respecto a la inicial, esto asociado a las zonas donde existe una disminución de 3% de volumen de yeso para ambos modelos. Por otro lado, la porosidad mínima (relacionada al aumento en el volumen de yeso) alcanza un 0% en las celdas donde se produce el ingreso del contaminante orgánico alcanzando un radio de 8 metros desde el punto de ingreso. Se explica esta relación directa entre la porosidad y el volumen de yeso dado que es el único mineral presente en el sistema que presenta variaciones significativas que pueden afectar de forma notoria la porosidad.

El pH mínimo difiere en 0,77 entre ambos modelos ya que, en el caso del segundo modelo, existe la presencia de un ácido lo cual produce un descenso rápido de este parámetro en las zonas de entrada del fluido. Finalmente, en el primer modelo el pH máximo alcanzado es de 7,068 y se da con una porosidad inicial de 12% mientras que, para el segundo este es de 7,064 se da con una porosidad inicial de 19%. Dadas las magnitudes y las diferencias entre los fluidos que producen este cambio de pH en los dos modelos, no se puede atribuir exclusivamente ese cambio a la diferente porosidad.

En ambos modelos se observa la existencia de una disminución en las concentraciones de Ca^{2+} y SO_4^{2-} así como en el volumen de yeso en la zona de entrada del flujo de agua dulce del acuífero. Es decir, el ingreso constante de agua dulce en el sistema considerado logra mantener la capacidad de disolver yeso, aunque se detecten cambios incongruentes en los iones que forman este mineral ya que, en este frente de disolución

es de esperar que las concentraciones de los iones Ca^{2+} y SO_4^{2-} aumenten, sin embargo, esto no ocurre.

Por último, el modelo que contempla la salinización y la contaminación orgánica no muestra una clara influencia de agua de mar en los procesos de contaminación por BTEX. Esto se debe al hecho que el modelo implementado no considera todas las complejas interacciones que ocurren en la naturaleza. De hecho, en zonas con presencia de intrusión marina se observa una mayor biodegradación por bacterias aeróbicas que actúan sobre estos contaminantes, pero al no considerar este proceso en las simulaciones realizadas claramente no se puede observar este efecto.

La porosidad inicial no es el único factor capaz de afectar la evolución del sistema, es por esto que se realizan modelos alternativos en los cuales se varió la temperatura inicial, el pH de la intrusión marina y la configuración espacial de los lentes de arcilla y limo transformándolos en capas continuas tal como muestra la Figura 4.32. A continuación, se presentan las observaciones y discusiones desprendidas de estos cambios a modelos. Cabe destacar que todos los modelos fueron realizados con una porosidad inicial de 12%.

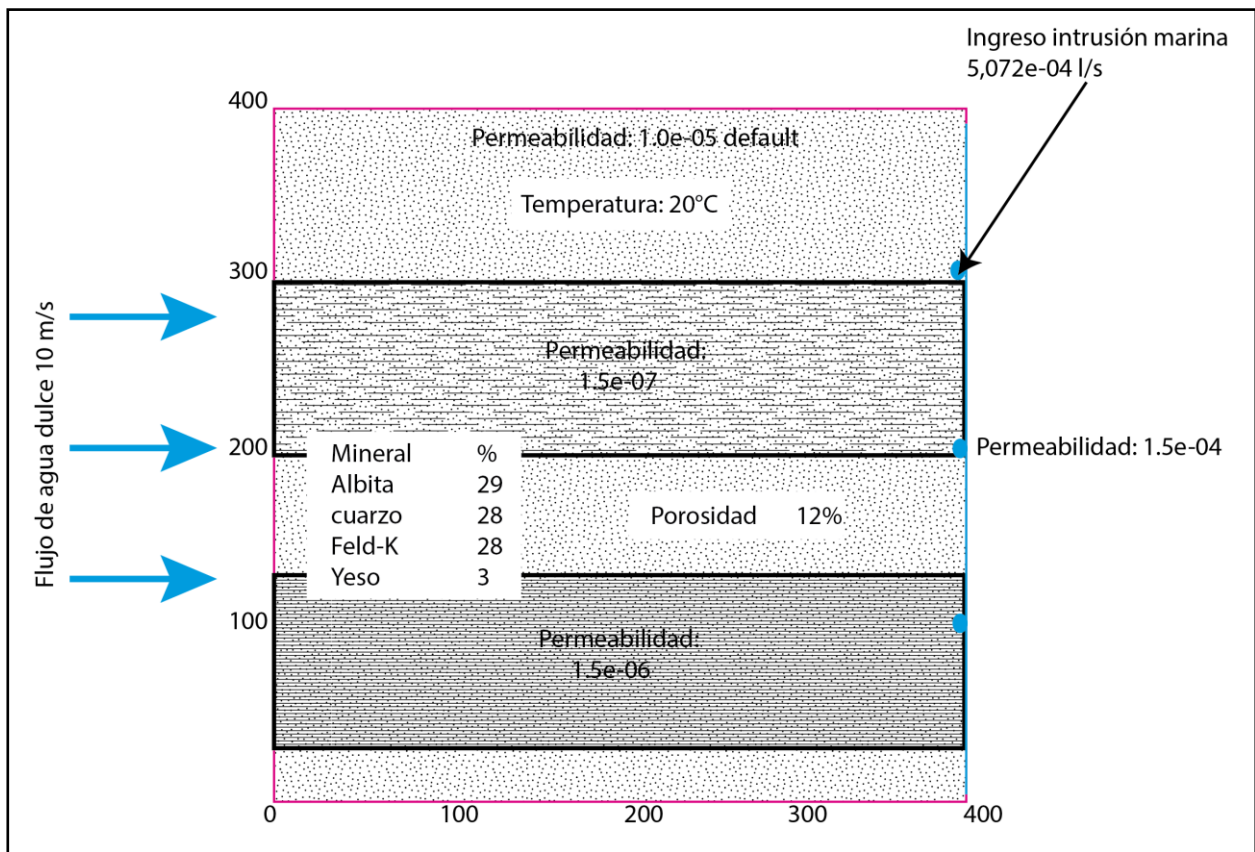


Figura 4.32 Variación de la configuración espacial del modelo de intrusión marina.
Fuente: Elaboración propia.

4.4.1 Temperatura inicial

La temperatura inicial del sistema se varía de 20°C a 30°C considerando que 10°C es un cambio de temperatura significativo entre un área subtropical a tropical.

En el modelo de intrusión marina las concentraciones de los iones obtenidas son más bajas en comparación al caso de 20°C de temperatura inicial, disminuyendo 0,05 mol/kgw en el caso de Cl^- , Na^+ y Mg^{2+} y 0,002 mol/kgw en el caso del Ca^{2+} y SO_4^{2-} . Respecto al volumen de los minerales se puede ver una disminución en el yeso pasando de un 11% máximo a un 6%, mientras que, en el caso de la calcita se observa un aumento del volumen de 0,1% a 0,29%. Además, el pH varía cambiando de 7,06 a 7,03 observándose un menor aumento de este a mayor temperatura.

En el caso del modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado la acción de la temperatura es diferente. Existe una disminución mínima en las concentraciones de Cl^- y Na^+ alcanzando solo 0,001 mol/kgw, por otro lado, el SO_4^{2-} presenta un aumento de 0,001 mol/kgw. En el caso del Mg^{2+} , Ca^{2+} , benceno y ácido acético no se observan cambios. Además, existe un aumento en el volumen de calcita y yeso, sin embargo, este último solo aumenta en un 0,0002%, mientras que, la calcita aumenta su volumen en 0,69%. El pH mínimo alcanzado disminuye de 6,22 a 6,11 y el máximo mantiene su valor.

Con respecto a los patrones de propagación se observan diferencias en comparación al modelo inicial. Tanto en el modelo de intrusión marina como en el de contaminantes orgánicos en un acuífero costero salinizado no se observan diferencias en las especies principales a excepción del SO_4^{2-} (Figura 4.33) el cual, en este último escenario, se ve un aumento afectando 100 metros en contra de la dirección de flujo desde la celda de entrada de BTEX (Figura 4.33b), mientras que, en el caso de menor temperatura el frente afectado alcanza los 80 metros a los 60 años desde la celda de entrada del contaminante orgánico (Figura 4.33a).

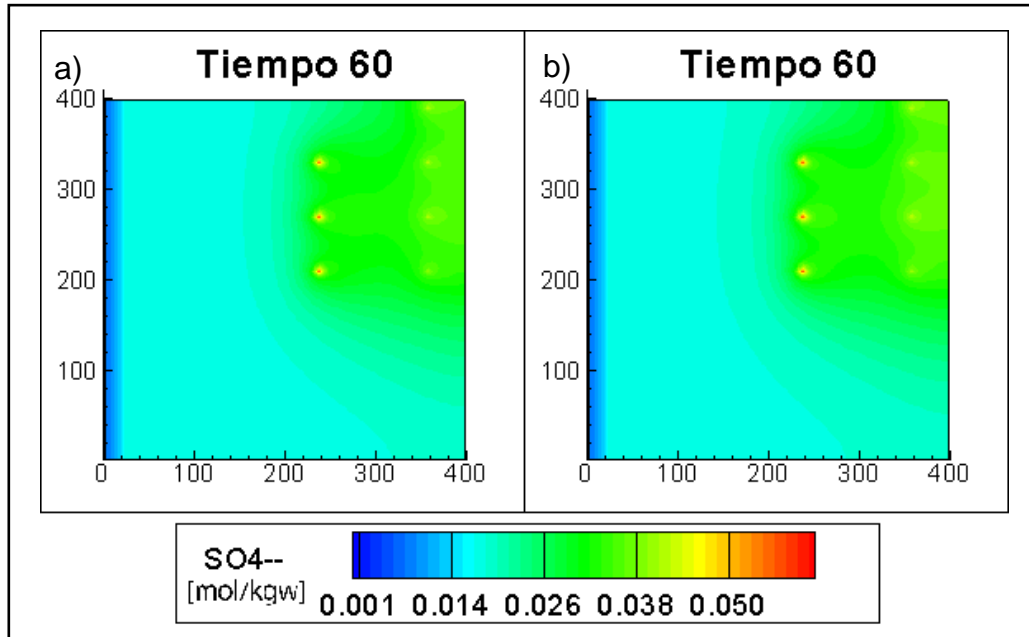


Figura 4.33 Variación del patrón para el SO_4^{2-} a los 60 años de simulación. Caso: a) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 20°C ; b) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 30°C . Fuente: elaboración propia.

Con respecto a la mineralogía, en el modelo de intrusión marina se ve un mayor volumen de calcita en dirección de flujo (Figura 4.34), sin embargo, este efecto es localizado sin tener una expansión mucho mayor desde la celda de entrada de la intrusión. En el modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado también se observa un aumento en el volumen de calcita centrándose en las celdas de entrada de contaminante orgánico (Figura 4.35).

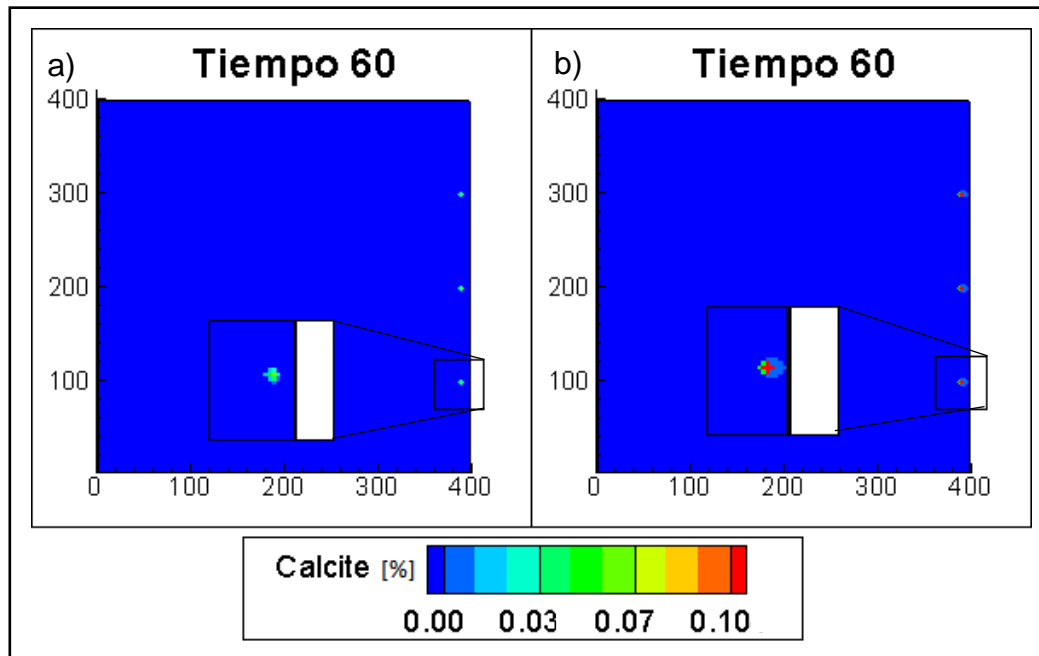


Figura 4.34 Variación del patrón para la calcita a los 60 años de simulación. Caso: a) modelo de intrusión marina a los 60 años con temperatura inicial 20°C; b) modelo intrusión marina a los 60 años con temperatura inicial 30°C. Fuente: elaboración propia.

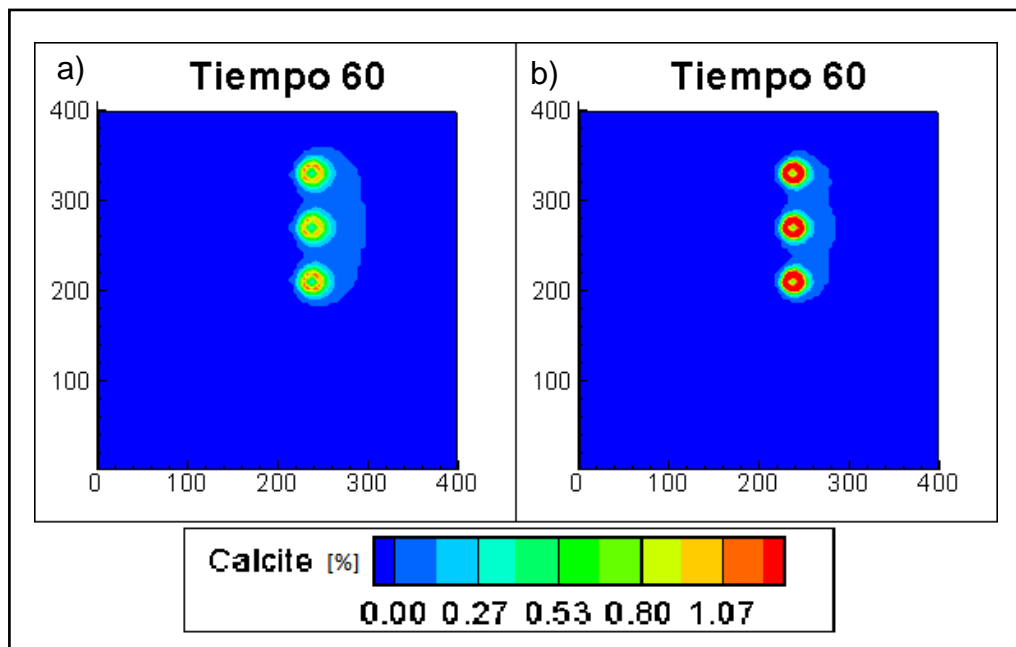


Figura 4.35 Variación del patrón para la calcita a los 60 años de simulación. Caso: a) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 20°C; b) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 30°C. Fuente: elaboración propia.

Finalmente, respecto al pH se observa que la variación de la temperatura provoca una mayor área de afectación desde la celda de entrada del contaminante orgánico afectando 120 metros desde esta en el modelo inicial (Figura 4.36a) y 140 metros en el modelo con temperatura inicial 30°C (Figura 4.36b).

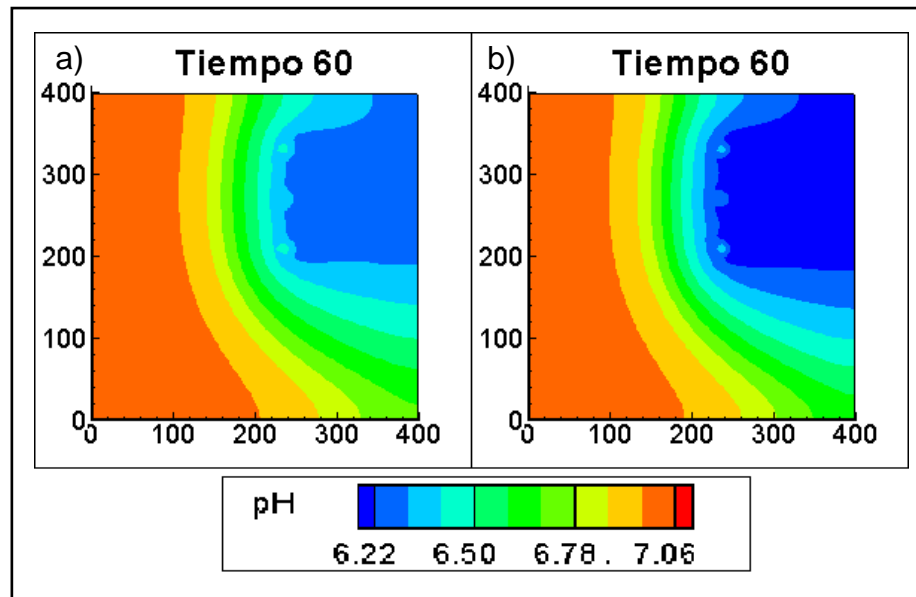


Figura 4.36 Variación del patrón para el pH a los 60 años de simulación. Caso: a) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 20°C; b) modelo de contaminación por BTEX en un acuífero salinizado a los 60 años con temperatura inicial 30°C. Fuente: elaboración propia.

4.4.2 pH de la intrusión

Se varía el pH de la intrusión marina en ambos modelos, aumentando de 7,78 a 8,5, considerando este último valor como límite superior del pH presente en el mar.

Ambos modelos presentan una disminución en las concentraciones de Cl^- , Na^+ y Ca^{2+} , además de en el volumen de yeso, sin embargo, en ambos la magnitud en la que disminuyen es diferente. En el caso donde existe la presencia solo de intrusión marina se ve una disminución de 0,05 mol/kgw para el Cl^- , Na^+ y Mg^{2+} , 0,001 mol/kgw de Ca^{2+} y una disminución de 3,31% para el yeso, mientras que, en el caso de la contaminación con contaminantes orgánicos en un acuífero salinizado, esta última disminución es solo de 0,0003%. Además, con un ingreso de contaminantes orgánicos los valores de Cl^- , Na^+ y Mg^{2+} disminuyen 0,001 mol/kgw y la variación del Ca^{2+} solo alcanza los 0,00001 mol/kgw. Por otro lado, en este último modelo no se observan variaciones en las concentraciones de benceno, ácido acético, Mg^{2+} y SO_4^{2-} . Finalmente, en ambos modelos se ve un aumento en el volumen de calcita siendo mayor en el modelo de intrusión marina alcanzando un delta de 0,2%, mientras que, la variación alcanzada en el modelo de contaminación orgánica en un acuífero salinizado alcanza solo un 0,0006%

En cuanto a los patrones de afectación y cambios, el único parámetro que varía es el pH donde se puede observar un halo alrededor de la celda de entrada de la intrusión de pH

mayor a 7,04 en ambos modelos, sin embargo, el radio que ocupa esta zona es diferente en ambos casos. En el caso inicial con un pH de agua marina de 7,79 esta zona alcanza 30 m de radio (Figura 4.37a), mientras que, en el caso de un pH de agua marina 8,5 el halo de mayor pH alcanza un radio de 55 m (Figura 4.37b). El resto de los parámetros en ambos modelos se mantienen idénticos a la situación inicial.

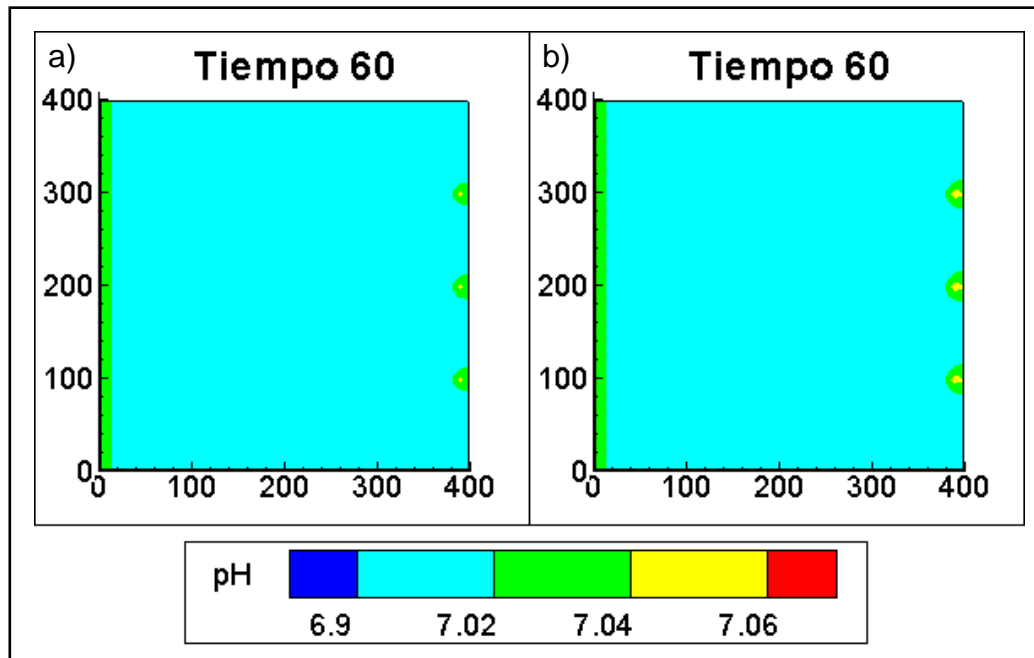


Figura 4.37 Modelo de intrusión marina, porosidad inicial 12%. Variación del patrón para el pH a los 60 años de simulación. A la derecha caso con variación de pH. Modelo de intrusión marina. Fuente: elaboración propia.

4.4.3 Configuración espacial

Solo se realizó una variación en la configuración espacial de los lentes para el modelo de intrusión marina.

Las concentraciones alcanzadas por las especies primarias son menores en comparación al modelo inicial, presentando una variación de 0,06 mol/kgw para el caso del Cl^- y Na^+ , 0,005 mol/kgw para el Mg^{2+} y 0,002 mol/kgw para el caso del Ca^{2+} y SO_4^{2-} . De igual modo, el yeso y la calcita alcanzan volúmenes menores disminuyendo un 3,2% en el caso del yeso y un 0,03% en el caso de la calcita. El pH máximo alcanzado disminuye en 0,03 y no se observan cambios en el avance de la porosidad.

En cuanto a los patrones de los posibles cambios no se ven diferencias con respecto al modelo inicial.

Finalmente, al observar estas variaciones en el sistema se desprende que tanto la temperatura, pH y la geología del sistema tienen incidencia en como las especies principales, mineralogía, porosidad y pH varía en ambos escenarios considerados, sin embargo, la magnitud en que estos parámetros perturban el sistema es diferente.

Considerando las variaciones recién analizadas, así como también tomando en cuenta las discusiones realizadas en torno a la porosidad inicial se extrae que el parámetro dominante en el avance del sistema es la temperatura ya que es donde se presentan mayores diferencias con respecto a los modelos iniciales, siendo así la temperatura el único parámetro induce variaciones significativas en los modelos considerados sobre todo en los minerales precipitados.

5. Conclusiones

Los acuíferos costeros son de suma importancia debido a su ubicación ya están asentados cerca de lugares poblados y agrícolas. Debido a los altos requerimientos de agua que se producen en estos lugares por la demanda relacionada al desarrollo urbano y turístico es que se llega a la sobreexplotación de estos, derivando en una salinización de estos acuíferos producto de la entrada de la cuña salina hacia el continente. Dado lo anterior, en este estudio se realizó el análisis de un acuífero costero tipo con pozos habilitados tanto en el acuífero inferior como superior en una línea de flujo, esto en presencia de agua de mar estándar derivando en lo siguiente.

El tipo de agua presente en el acuífero costero varía según la cercanía de la muestra a la costa. Las más lejanas presentan un tipo de agua bicarbonatada cálcica – magnésica, pasando a sulfatada cálcica – sódica en medio del acuífero, finalizando con agua de tipo clorurada cálcica – magnésica. La muestra 01 no sigue esta tendencia siendo extraída del acuífero inferior, bajo una capa de arcilla.

En el acuífero costero analizado se identifican procesos de intrusión marina, interacción agua-roca e intercambio catiónico directo e inverso. Las muestras 02, 03 y 04 presentan intrusión marina e intercambio catiónico inverso evidenciado por sus altas concentraciones de Mg^{2+} y Ca^{2+} y un déficit de Na^+ . Por otro lado, para las muestras 01 y 07 el proceso más importante es el intercambio catiónico directo evidenciado por un exceso de Na^+ y un déficit de Ca^{2+} . Se evidencia que la muestra 01 presenta una barrera de arcilla que la resguarda de la intrusión marina activa.

El porcentaje de agua de mar que afecta a las muestras varía de 0,007% a 1,7%. Los mayores porcentajes de agua marina se encuentran en las muestras más cercanas a la costa, exceptuando la muestra 01 con un 0,056%. Este bajo porcentaje de agua de mar en esta muestra confirma la acción de barrera provocada por el estrato arcilloso.

Al considerar una mezcla conservativa entre agua de mar y agua dulce se identifica la existencia de procesos modificadores dado que las concentraciones de las especies iónicas varían de las esperadas según el delta iónico. En las muestras 02, 03 y 04 se identifica un comportamiento contrapuesto de las especies Na^+ y Mg^{2+} - Ca^{2+} indicando la presencia de un intercambio catiónico inverso en estas muestras. En todo el sistema las concentraciones de SO_4^{2-} son inferiores a las esperadas lo cual se interpreta como producto de la interacción agua-roca donde, en cierta etapa de la intrusión, debió existir la precipitación de yeso provocando la disminución de las concentraciones de esta especie. También puede ser interpretado como una biodegradación donde los sulfatos son reducidos.

Los índices de saturación de la calcita y dolomita son mayores a las esperadas en una mezcla conservativa corroborando la existencia de procesos modificadores, como el intercambio iónico, que adicionan Ca^{2+} y Mg^{2+} . La halita coincide con la línea de mezcla teórica indicando que la presencia de este mineral esta netamente asociada a la intrusión marina.

El modelo de transporte reactivo de intrusión marina confirma que el proceso de interacción agua-roca constituye un factor importante en la composición del agua subterránea.

La porosidad inicial condiciona el volumen precipitado de calcita y yeso presentes en el sistema, aumentando el volumen precipitado en ambos modelos. No se tienen cambios en minerales con una baja tasa de reacción como el feldespato potásico, el cuarzo y la albita. Se observa que este factor no afecta en absoluto las concentraciones máximas de Cl^- , Na^+ y Mg^{2+} alcanzadas, afectando de manera despreciable las concentraciones de Ca^{2+} y SO_4^{2-} . Se ve que tanto el pH como el avance de la porosidad no se ven afectados por este factor

El pH del sistema se encuentra principalmente controlado por la entrada de ácido acético, encontrándose solo variaciones ínfimas en el caso donde no está presente este contaminante.

El avance de la porosidad se encuentra controlado por la disolución/precipitación de yeso, presentando un aumento máximo de 3% y llegando a un valor mínimo de 0% en el modelo de contaminación de BTEX en un acuífero costero salinizado.

El factor dominante en el avance del sistema es la temperatura, un aumento de esta provoca una disminución en las concentraciones de las especies primarias, volumen de yeso y pH, sin embargo, también provoca un aumento en el volumen de calcita presente en el sistema.

La validez de las afirmaciones viene condicionada a supuestos y limitaciones. En ambos modelos de CrunchFlow se utilizó PHREEQC para proponer las especies secundarias, pudiendo dejar de lado especies que afecten al sistema. Por otro lado, las simulaciones de transporte reactivo se ven limitadas por la mineralogía presente en la base de datos dejando de lado minerales necesario en la simulación.

Con el fin de poder realizar una caracterización real de los problemas de salinización en las costas chilenas se propone la realización de una campaña de sondajes en las costas con el fin de caracterizar la estratigrafía en el sistema que, en conjunto con parámetros hidrológicos e hidrogeológicos como el conocimiento de la pluviometría del sector estudiado, la cuantificación de las aguas superficiales que se infiltran y aquellas que se descargan de manera subterránea en el mar, además de parámetros como la conductividad hidráulica, la transmisividad y el coeficiente de almacenamiento, se hacen indispensables para realizar una caracterización acabada de un acuífero afectado por salinización. Lo anterior, en conjunto con un estudio hidrogeoquímico, puede llevar a cuantificar el real problema de la intrusión salina en Chile

6. Bibliografía

AMAT, D. 2012. Descontaminación de Hidrocarburos en el acuífero de la ciudad de Tyler, Alabama (EE.UU.). Máster RHyMA.

BOCANEGRA, E. y CUSTODIO, E. 1994. Utilización de acuíferos costeros para abastecimiento. Dos casos de estudio: Mar de Plata (Provincia de Buenos Aires, Argentina) y Barcelona (Cataluña, España). Ingeniería del agua. Vol 1. Num 4. pp. 49 - 78

BOLUDA-BOTELLA, N., GOMIS-YAGÜES, V., RUIZ-BEVIÁ, F. Y SAQUETE-FERRÁNDIZ, M^a. 2004. Gypsum precipitation/dissolution during seawater intrusion. 18 SWIM. Cartagena 2004, Spain. (Ed. Araguás, Custodio and Manzano). IGME 511- 519

BURKE, L., KURA, Y., KASSEM, K., REVENGA, C., SPALDING, M., MCALLISTER, D. 2001. Pilot Analysis of Global Ecosystems: Coastal Ecosystems. World Resources Institute. Washington D.C. 77 pp.

CELIS, H. 2008. Contaminación de aguas subterráneas por hidrocarburos líquidos livianos en fase no acuosa. Ciencia Ahora 22. Departamento de ingeniería Civil, Facultad de ingeniería, Universidad de Concepción.

COLOMBANI, N., OSTI, A., VOLTA, G., MASTROCICCO, M. 2016. Impact of climate change on salinization of coastal water resources. Water Resour. Manage. 30, 2483–2496.

CORRALES, L., ANTONILEZ, D., BOHÓRQUEZ, J., CORREDOR, A. 2015. Bacterias anaerobias: procesos que realizan y contribuyen a la sostenibilidad de la vida en el planeta. NOVA. 2015; 13 (23): 55-81

CUSTODIO, E. y LLAMAS, M. R. 1983. Hidrología subterránea. Editorial Omega. Barcelona. Volumen 1, 2359 p.

CUSTODIO, E. 2009. Coastal Aquifers of Europe: an overview. Hydrogeology Journal (2010) 18: 269–280

DANIELE, L., VALLEJOS, A., SOLA, F., CORBELLÁ, M., PULIDO-BOSCH, A. 2011. Hydrogeochemical processes in the vicinity of a desalination plant (Cabo de Gata, SE Spain). Desalination 277, 338–347.

DANIELE, L., VALLEJOS, A., CORBELLÁ, M., MOLINA, L., PULIDO-BOSCH, A. 2013. Hydrogeochemistry and geochemical simulations to assess water–rock interactions in complex carbonate aquifers: the case of Aguadulce (SE Spain). Appl. Geochem. 29, 43–54.

DE ANDRÉS, M., BARRAGÁN, J.M. 2016. Desarrollo Urbano en el Litoral a Escala Mundial. Método de Estudio para su Cuantificación. Revista de Estudios Andaluces, vol. 33 (1), 64-83

DGA, 2004. Diagnóstico y clasificación de los cursos y cuerpos de agua según objetivos de calidad. Cuenca del río Aconcagua. Ministerio de Obras Públicas, Dirección General de Aguas, Santiago, Chile. 154 p

ESRI. 2016. ArcMap (10.4.1) [Software]. Recuperado de <https://support.esri.com/es/products/desktop/arcgis-desktop/arcmap/10-4-1>

ESTELLES, V.A. 2012. Recuperado de <https://es.slideshare.net/Bioestelles/tema-11-contaminacin-de-las-aguas>

FAYEMIWO, O., DARAMOLA, M., MOOTHI, K. 2017. BTEX compounds in water – future trends and directions for water treatment. South Africa. ISSN 1816-7950 (Online): Water SA Vol. 43 No. 4 October 2017

FERGUSON, G., GLEESON, T. 2012. Vulnerability of coastal aquifers to groundwater use and climate change. Nat. Clim. Change 2, 342–345.

FERNÁNDEZ, D. 2015. Procesos hidrogeoquímicos en el acuífero de Balanegra (SE, España). Memoria de título, Departamento de Geología, Universidad de Chile, 58 p

FIDELIBUS, M.D., GIMENEZ, E., MORENO-CALVILLO, I. TULIPANO, L. 1993. Salinization processes in the Castellon Plain aquifer (Spain). Study and Modelling of Saltwater intrusion into Aquifers. In: Custodio, E. Galofré, A. (Eds), Study and Modelling of Salt Water Intrusion. CIMNE-UPC, Barcelona, pp.267-283.

GENG, X., BOUFADEL, M., CUI, F. 2017. Numerical modeling of subsurface release and fate of benzene and toluene in coastal aquifers subjected to tides. Journal of Hydrology 551 (2017) 793–803

HEM, J. D. 1985. Study and Interpretation of the Chemical Characteristics of Natural Water. U. S. Geological Survey Water – Supply Paper 2254, 263 pp.

IOC/UNESCO, IMO, FAO, UNDP. 2011. "A Blueprint for Ocean and Coastal Sustainability". An inter-agency paper towards the preparation of the UN Conference on Sustainable Development (Rio+20), Paris: IOC/UNESCO. 42 pp.

IREN: Instituto de Investigación de Recursos Naturales – CORFO, 1966. Inventario de las dunas en Chile (29 48'-41 50' LAT. SUR). Publicación N°4.

JARA, M. 2016. Simulación de sistemas hidrotermales mediante modelos de transporte reactivos: el caso de San Felipe – Los Andes, Chile Central. Memoria de título, Departamento de Geología, Universidad de Chile, 116 p

- KOUZANA, L., BEN, A., SFAR, M. 2009. Seawater intrusion and associated processes: Case of the Korba aquifer (Cap-Bon, Tunisia). *C. R. Geoscience* 341 (2009) 21–35
- MITRA S. Y ROY P. 2011. BTEX: A serious ground-water contaminant. *Res. J. Environ. Sci.* 5 (5) 394–398.
- MORELL, I. 2003. Acuíferos costeros detríticos. Departamento de Ciencias experimentales. Universitat Jaume I. Castellón. p. 31-43
- PARKHURST, D. L. Y APPELO, C. A. J. (1999). User's guide to PHREEQC (Version 2) - A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations. U.S. Geological Survey. Water-resources Investigations Report 99-4259, 312 p.
- PENDÁS, F. 1988. Acuíferos costeros e intrusión marina. Oviedo. En: Tecnología de la intrusión en Acuíferos Costeros (TIAC'88). Almuñécar (Granada), p. 177
- PETALAS, C., LAMBRAKIS, N. 2006. Simulation of intense salinization phenomena in coastal aquifers. The case of the coastal aquifers of Thrace. *J. Hydrol.* 324, 51-64.
- PULIDO-BOSCH, A. 2007. Nociones de hidrogeología para ambientólogos. Editorial Universidad de Almería. Almería. 492p
- PULIDO-LEBOEUF, P. 2004. Seawater intrusion and associated processes in a small coastal aquifer (Castel del Ferro, Spain). *Appl. Geochem.* 19, 1517-1527.
- ROBINSON C, GIBBES B, LI L. 2006. Driving mechanisms for flow and salt transport in a subterranean estuary. *Geophys Res Lett* 2006;33:L03402.
- ROBINSON C, LI L, BARRY DA. 2007. Effect of tidal forcing on a subterranean estuary. *Adv Water Resour* 2007;30:851–65.
- SAEED, T. Y AL-MUTAIRI, M. 1999. Chemical composition of the water-soluble fraction of the leaded gasolines in seawater. *Environ. Int.*, 25: 117-129.
- SERNAGEOMIN, 2003. Mapa Geológico de Chile: versión digital. Servicio Nacional de Geología y Minería, Publicación Geológica Digital, No. 4 (CD-ROM, versión 1.0, 2003). Santiago. Escala 1.000.000.
- SIMLER, R. (2013). Diagrammes (6.59) [Software]. Recuperado de <http://www.lha.univ-avignon.fr/LHA-Logiciels.htm>
- STEEFEL, C. 2009. CrunchFlow.: Software for Modeling Multicomponente Reactive Flow and Transport. User's Manual.

STEEFEL, C., DEPAOLO, D., C.LICHTNER, P. 2005. Reactive transport modeling: An essential tool and a new research approach for the Earth sciences. *Earth and Planetary Science Letters* 240 (2005) 539 – 558

SQUEO, F., ARAVENA, R., AGUIRRE, E., POLLASTRI, A., JORQUERA, C., EHLERINGER, J. 2006. Groundwater dynamics in a coastal aquifer in north-central Chile: Implications for groundwater recharge in an arid ecosystem. *Journal of Arid Environments* 67 (2006) 240–254

VALLEJOS, A., SOLA, F., PULIDO-BOSCH, A. 2014. Processes Influencing Groundwater Level and the Freshwater Saltwater Interface in a Coastal Aquifer. *Water Resour Manage* (2015) 29:679–697

VALLEJOS, A., SOLA, F., YECHIELI, Y., PULIDO-BOSCH, A. 2017. Influence of the paleogeographic evolution on the groundwater salinity in a coastal aquifer. Cabo de Gata aquifer, SE Spain. *Journal of Hydrology* 557 (2018) 55–66

WERNER, A.D., BAKKER, M., POST, V.E.A., VANDENBOHEDE, A., LU, C., ATAIE-ASHTIANI, B., SIMMONS, C.T., BARRY, D.A. 2013. Seawater intrusion processes, investigation and management: recent advances and future challenges. *Adv. Water Resour.* 5, 3–26.

WEST, I., ALI, Y. Y HILMY M. 1979. Primary gypsum nodules in a modern sabkha on the Mediterranean coast of Egypt.

ZHENG, C. Y JIAO, J. J. 1998. Numerical simulation of tracer test in heterogeneous aquifer. *J. Environ. Eng.* 1998.124:510-516.

7. Anexo

ANEXO A: Ejemplo de código en CrunchFlow. Fuente: Jara, 2016

```

TITLE
Modelo Piloto MJC
END

DATABASE
Maururu.dbs
END

RUNTIME
coordinates          rectangular
correction_max      2.0
!!courant_number
database_sweep       false
debye-huckel         true
density_module       temperature
dissolution_max      0.002
!!fix_saturation
!!generic_rates
gimrt                true
gimrt_pc             bjacobi
gimrt_pclevel        5
gimrt_solver         gmres
graphics             tecplot
!!hindmarsh
lag_activity         true
!!later_inputfiles
master               H+
OvershootTolerance  5.E-07
pc                   ilu
pc_level             5
!!precipitation_max
reaction_path        false
!!read_saturationfile
!!restart
!!save_restart
screen_output        10
solver               gmres
steady-state         false
timestep_max         0.05
timestep_init        1.e-10
time_tolerance       0.001
END

OUTPUT
time_units           years
spatial_profile      0.0001 0.1 0.5 1 2 5 10 30 50 100 200 400
600 800 1000
Time_series_at_node  TimeSeries_pre_intr.out  5  50
Time_series_at_node  TimeSeries_syn_intr.out  45 50
Time_series_at_node  TimeSeries_post_intr.out 190 50
time_series_print
time_series_interval 1
END

```

Base de datos modificada

Keyblock que agrupa parámetros referentes al método de solución para las ecuaciones principales. Incluye también parámetros referentes a la

Magnitud absoluta de la máxima corrección al logaritmo natural de una especie en cualquier paso de Newton.

Máximo descenso en la fracción mineral para todo paso de tiempo ($m^3 mineral/m^3$ medio poroso).

Especie maestra usada para controlar el paso de tiempo

Método de preconditionador para solución de ecuaciones en PETSc

Tolerancia para la segunda derivada del cambio en el logaritmo natural de la especie maestra respecto al tiempo. Ayuda a la estabilidad numérica controlando el tamaño del paso de

Monitoreo evolución de concentración de especies principales en puntos fijos de la grilla para todo el transcurso de la





Figura 4.3 Desglose de código implementado para Simulación IL.4 (I/IV)

Simulación de sistemas hidrotermales mediante modelos de transporte reactivo: el caso de San Felipe - Los Andes, Chile Central



```

POROSITY
porosity_update true
END

TEMPERATURE
set_temperature 100.0
END

PRIMARY_SPECIES
H+
SiO2 (aq)
Al+++
K+
HCO3-
Ca++
Cl-
Mg++
Na+
SO4--
Fe+++
Fe++
!!OH-
END

SECONDARY_SPECIES
OH-
HSO4-
!!Al (OH) 4-
!!CaCl+
Al (OH) 3 (aq)
Al (OH) 2+
CaCO3 (aq)
CaHCO3+
CaSO4 (aq)
!!Fe (OH) 3
!!KSO4-
!!MgCl+
!!MgOH+
MgHCO3+
MgCO3 (aq)
MgSO4 (aq)
NaHCO3 (aq)
END

GASES
CO2 (g)
END

```

Temperatura global del sistema

Especies primarias que representan las incógnitas en la parte química de un problema de transporte reactivo. Las ecuaciones diferenciales parciales para la conservación de masa en el sistema, son escritas en términos de la concentración total de estas especies.

Especies secundarias que pueden ser escritas en términos de las especies primarias, mediante una reacción que se asume en equilibrio, pudiendo así ser escritas en términos de las especies primarias. En esta lista se incluyen aquellas especies cuya concentración es considerable (se fija un valor umbral); dicho análisis se efectúa a través de la

Líneas de código con !! son ignoradas por el software.

	<p>Figura 4.4</p>	<p>Desglose de código implementado para Simulación II.4 (II/IV)</p>	
<p>Simulación de sistemas hidrotermales mediante modelos de transporte reactivo: el caso de San Felipe - Los Andes, Chile Central</p>			

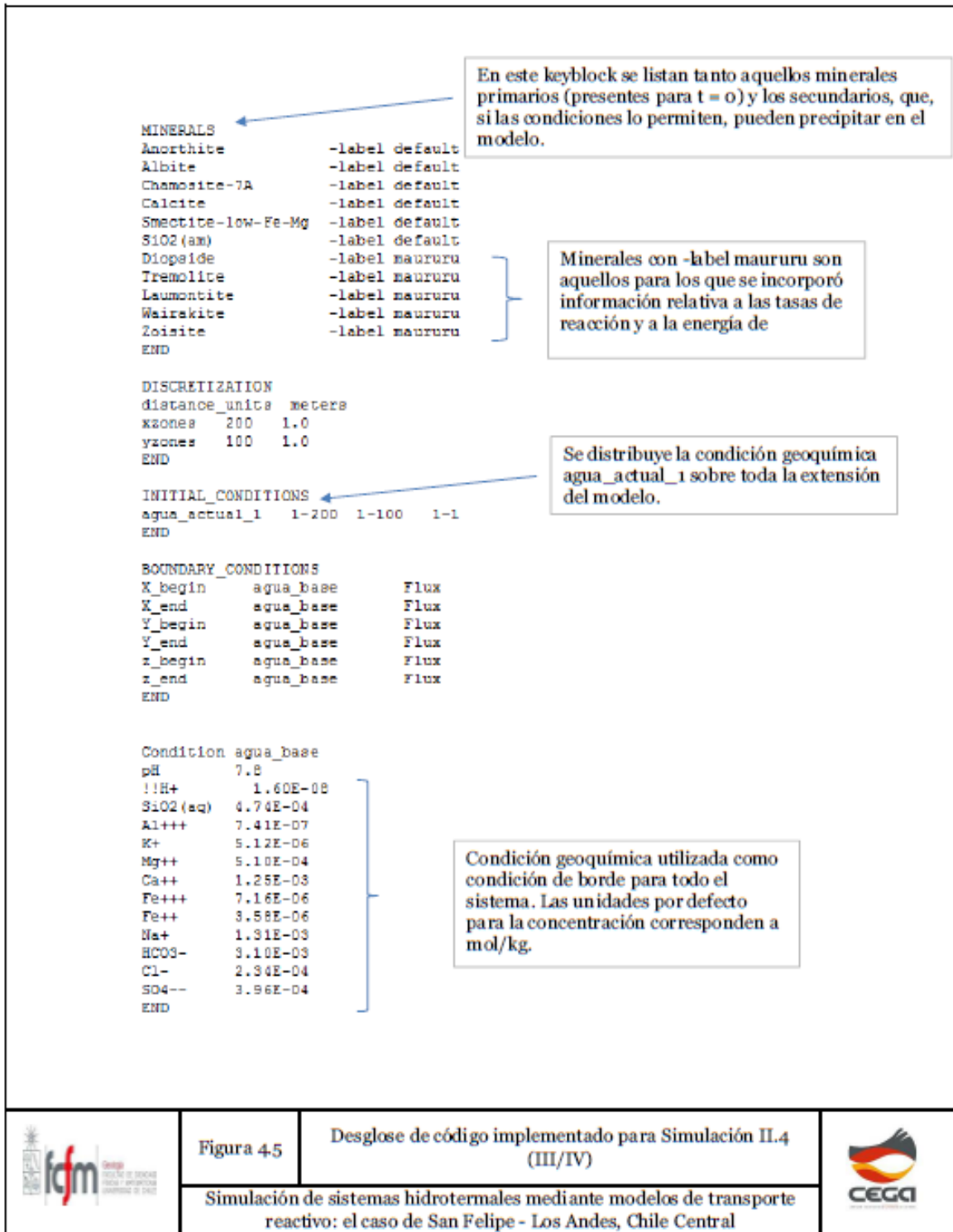


Figura 4.5

Desglose de código implementado para Simulación II.4 (III/IV)



Simulación de sistemas hidrotermales mediante modelos de transporte reactivo: el caso de San Felipe - Los Andes, Chile Central

```

Condition agua_actual_1
pH 7.8
!!H+ 1.60E-08
SiO2(ag) 4.74E-04
Al+++ 7.41E-07
K+ 5.12E-06
Mg++ 5.10E-04
Ca++ 1.29E-03
Fe+++ 7.16E-06
Fe++ 3.58E-06
Na+ 1.31E-03
HCO3- 3.10E-03
Cl- 2.34E-04
SO4-- 3.96E-04
Anorthite 0.50 100
Albite 0.20 100
Diopside 0.20 100
Tremolite 0.05 100
Laumontite 0.00 100
Chamosite-7A 0.00 100
Calcite 0.00 100
Smectite-low-Fe-Mg 0.00 100
SiO2(am) 0.00 100
Wairakite 0.00 100
Zoisite 0.00 100
END

TRANSPORT
time_units years
diffusion 1.0
dispersivity 20.0 20.0
END

FLOW
distance_units meters
time_units years
constant_flow 1.0 0.0 0.0
calculate_flow true
gravity 90.0 0.0 90.0 down
permeability_X 1.0E-08 default
permeability_Y 1.0E-08 default
permeability_X 0.0 zone 0-0 1-100 1-1
permeability_X 0.0 zone 201-201 1-100 1-1
permeability_Y 0.0 zone 1-200 0-0 1-1
permeability_Y 0.0 zone 1-200 101-101 1-1
permeability_X 1.0E-05 zone 201-201 1-30 1-1
permeability_Y 1.0E-05 zone 80-120 101-101 1-1
permeability_X 5.0E-07 zone 80-120 1-100 1-1
permeability_Y 5.0E-06 zone 80-120 1-100 1-1
pressure 5.0E06 default
pressure 4.5E06 zone 80-120 1-100 1-1 fix
END

```



Condición geoquímica que en este modelo se distribuye sobre todo el dominio espacial.

Concentración de minerales en t=0. Minerales con valores mayores a 0 representan la mineralogía primaria. Los minerales con concentración cero corresponden a los secundarios, los que podrían o no precipitar en función de la configuración del modelo.

Corresponde al flujo de Darcy. Valores en m³/m²/año.

Configuración de zonas de permeabilidad. Ver figura 4.2.

Definición de presión hidrostática en unidades de Pa. Notar que en zona de falla la presión


Figura 4.6
Desglose de código implementado para Simulación II.4 (IV/IV)


Simulación de sistemas hidrotermales mediante modelos de transporte reactivo: el caso de San Felipe - Los Andes, Chile Central

Anexo B: Error del balance iónico y composición del agua

B1: Error en el balance iónico

Muestra	Error (%)
01	5,00
02	- 3,61
03	- 1,78
04	- 2,61
05	- 0,03
06	- 4,71
07	- 0,09
08	0,54
09	3,66
10	3,63
11	4,92
12	1,93
13	- 1,43

B2: Composición del agua subterránea

Muestra	C ⁻ (meq/L)	SO ₄ ²⁻ (meq/L)	Na ⁺ (meq/L)	K ⁺ (meq/L)	Ca ²⁺ (meq/L)	Mg ²⁺ (meq/L)	HCO ₃ ⁻ (meq/L)
01	1.244	1.280	2.696	0.061	0.968	0.646	1.608
02	8.601	0.429	3.217	0.091	4.805	3.413	2.228
03	10.180	1.078	3.348	0.124	6.587	4.507	3.491
04	7.417	1.387	2.870	0.074	3.318	3.240	0.938
05	1.156	0.174	1.313	0.051	1.063	0.711	1.298
06	3.271	1.435	2.043	0.051	1.771	1.571	0.505
07	2.140	2.103	2.370	0.063	1.617	2.204	1.813
08	0.981	1.249	1.426	0.082	1.527	0.880	1.295
09	1.469	0.706	2.087	0.096	1.747	1.102	2.519
10	1.359	0.454	1.470	0.064	1.407	0.962	1.772
11	0.939	1.911	1.817	0.072	1.742	0.962	1.449
12	2.076	0.009	1.848	0.080	1.931	2.418	4.088
13	1.720	2.207	2.609	0.096	6.038	4.762	9.807