



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE INGENIERÍA

**IDENTIFICACIÓN DE LOS PROCESOS
HIDROGEOQUÍMICOS EN EL SISTEMA
LAGUNAR MONTEBELLO, MEDIANTE LA
MODELACIÓN INVERSA EN PHREEQC.**

TESIS

Que para obtener el título de

Ingeniero Civil

P R E S E N T A

José Abel Lozada Trujillo

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Luis Antonio García Villanueva



Ciudad Universitaria, Cd. Mx., 2018

AGRADECIMIENTOS.

Agradezco el apoyo brindado para la realización de esta tesis de licenciatura, al **Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (PAPPIT), con clave IA108117. Título :** Optimización del método “extracción por sorción con barras magnéticas (SBSE)” acoplada a cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) para la determinación de atrazina en agua, para su posterior análisis en muestras acuosas del Sistema Lagunar Montebello Chiapas, México.

Y de manera especial a todas las personas e instituciones por el apoyo brindado en la realización de este trabajo y quienes lo continuarán desarrollando a favor de la preservación de los recursos hídricos.

Por esta razón también, obrando con toda diligencia, añadid a vuestra fe, virtud, y a la virtud, conocimiento; al conocimiento, dominio propio, al dominio propio, perseverancia, y a la perseverancia piedad, a la piedad, fraternidad y a la fraternidad, amor.

2 Pedro 1:5-7

Resumen.

Este trabajo aborda una problemática actual, la cual se concentra en uno de los lugares más emblemáticos del estado de Chiapas, México. Se trata de una serie de lagos encontrados en el Parque Nacional Lagunas de Montebello PNLN, el cual ha presentado alteraciones de importancia desde hace 15 años. Con el uso del modelado hidrogeoquímico inverso mediante PHREEQC, se busca identificar los procesos hidrogeoquímicos predominantes en el lugar, mediante los cuales se conocerá con mayor detalle la calidad química del agua en su constante interacción con la geología del sitio, determinando el grado de alteración a causa de las actividades antropogénicas desarrolladas alrededor del sitio como la agricultura y las descargas de aguas industriales y aguas negras que llegan a esta serie de lagos.

Encontrando que debido al marco geológico de la región kárstica, donde se encuentran en abundancia rocas constituidas por dolomitas, calizas y formaciones de yeso, uno de los principales procesos determinados por la modelación y comprobados por la comparación con el sitio, es la precipitación de yeso debido a su baja solubilidad, así como reacciones de oxidación y reducción de la materia orgánica, precipitación o disolución de elementos nitrogenados y sales provenientes de las descargas realizadas al cauce del río Grande que alimenta al sitio de estudio.

Índice General.

Índice Tablas.....	7
Índice Figuras.	8
Introducción.	9
Capítulo I. Objetivos y alcances.....	11
I.I. Planteamiento del problema.....	11
I.II. Objetivo general.	11
I.III. Objetivos particulares.....	12
I.IV Alcances:.....	12
Capítulo II. Marco teórico.	13
II.I. Suelo.	13
II.I.1. Propiedades y tipos de suelo.....	13
II.II. Mineral.	13
II.III. Rocas.....	13
II.IV. Agua.	14
II.IV.1. Propiedades físicas y químicas del agua.....	15
II.V. Parámetros principales.....	15
II.VI. Análisis químico del agua.	17
II.VI.1. Iones.	18
II.VII. Clasificación de los tipos de agua por su composición química.	21
II.VII.1. Diagramas de Stiff.	23
II.VII.2. Diagramas de Piper y Hill.....	25
II.VII.3. Representación geoestadística (SIG).	25
Capítulo III. Hidrogeoquímica.....	27
III.I. Antecedentes.....	27
III.II. La Hidrología y el ciclo del agua en la naturaleza.	27
III.III. Adquisición de la composición química del agua.	29
III.IV. Leyes de la cinética química.	30
III.IV.1. Equilibrio Químico.	30
III.V. Cinética de disolución de los minerales.	33
III.VI. Mecanismos de disolución.	34
III.VII. Diagramas Eh-pH.	39
Capítulo IV. Modelación hidrogeoquímica.....	41
IV.I. Antecedentes.....	41
IV.I.1. Enfoque Termodinámico.	42
IV.I.2. Índice de Saturación (IS).	42

IV.I.3.	Procedimiento de los cálculos del IS en el modelo.	42
IV.I.4.	Alcance de aplicación del equilibrio químico.	43
IV.II.	Tipos de modelos hidrogeoquímicos.....	43
IV.II.1.	Modelación directa:.....	43
IV.II.2.	Modelación inversa:	44
IV.II.	Modelos de especiación y solubilidad.	45
IV.III.	Modelos de balance de masa.	46
IV.IV.	Modelos de transferencia de masa.	46
IV.V.	Código de transporte de masa química.....	46
IV.VI.	PHREEQC.....	47
Capítulo V. Modelación hidrogeoquímica inversa en PHREEQC Version 3--A.		49
V.I.	Parámetros a considerar.	49
V.II.	Introducción de datos.....	50
V.III.	Almacenamiento y procesamiento de datos.....	54
Capítulo VI. Sitio de estudio.		60
VI.III.	Geografía.	62
VI.I.	Características hidrogeológicas.	63
VI.I.1.	Marco geológico regional.	63
VI.I.2.	Geología local.	64
VI.II.	Geomorfología.....	65
VI.IV.	Clima.	68
VI.V.	Flora.....	69
VI.VI.	Fauna.	70
Capítulo VII. Identificación de los procesos principales.....		72
VII.I.	Recopilación de datos.....	72
VII.II.	Análisis estadístico.....	73
VII.III.	Análisis gráfico.....	76
VII.IV.	Modelación.....	79
VII.V.	Resultados de la modelación.....	80
VII.VI.	Discusión de resultados.....	83
Capítulo VII. Conclusiones y recomendaciones.....		87
Referencias.....		89
Anexo 1. Modelos hidrogeoquímicos inversos.		93

Índice Tablas.

Tabla 3.1. Distribución del agua en la Tierra de acuerdo con su naturaleza en porcentaje.	28
Tabla 3.2. Distribución en porciento del agua en la Tierra.	28
Tabla 3.3. Rangos de concentración normales en aguas no contaminadas y las diferentes fuentes de los elementos. .	30
Tabla 3.4. Constantes de equilibrio en diferentes procesos químicos.	32
Tabla 3.5. Valores de potencial redox en reacciones a condiciones optimas.	39
Tabla 5.1. Análisis químico de las muestras de agua (mmol/L).	49
Tabla 6.1. Transformación de los usos de suelo en PNLN.	70
Tabla 6.2. Cuadro de especies del PNLN.	71
Tabla 7.1.: Representación estadística del muestreo realizado al grupo de lagunas afectadas en el PNLN.	75
Tabla 7.2.: Análisis estadístico del muestreo realizado al grupo de lagunas afectadas en el PNLN.	75
Tabla 7.3. Resultados de modelo inverso en lagos Bosque Azul – Yalmus.	80
Tabla 7.4. Fertilizantes utilizados en el sitio de estudio y regiones aledañas.	81
Tabla 7.5. Resultados de modelo inverso en lagos Yalmus – San Lorenzo.	81
Tabla 7.6. Resultados de modelo inverso en lagos San Lorenzo – Vuelta el Agua.	82
Tabla 7.7. Resultados de modelo inverso en lagos Vuelta el Agua – Balamtetic-Tepancoapan.	82

Índice Figuras.

Figura 2.1 Estructura molecular del agua.....	14
Figura 2.2 Esquema de asociación de moléculas de agua.....	15
Figura 2.3. Disolución de una sustancia.....	17
Figura 2.4. Clasificación de familias de aguas según Alekin (1957).....	22
Figura 2.5. Diagrama columnas de Collins en epm.....	23
Figura 2.6. Diagrama circular en epm.....	23
Figura 2.7(a y b). Representación de la composición química de aguas salinizadas mediante diagramas de Stiff.....	24
Figura 2.8. Diagrama de Piper-Hill-Langelier.....	25
Figura 2.9. Mapas de isolíneas de conductividad eléctrica.....	26
Figura 2.10. Distribución espacial de los tipos hidroquímicos de aguas.....	26
Figura 3.1. Secuencias de las principales reacciones redox con valor de pH=7 en un sistema natural.....	38
Figura 3.2. Tipos de agua en relación a las variantes de pe & pH en condiciones naturales.....	39
Figura 3.3. Relación Eh-pH para iones Fe++ y modos de equilibrio químico.....	40
Figura 4.1. Esquema para el cálculo del IS.....	43
Figura 5.1. Ventana ejecutable del software.....	51
Figura 5.2.Introducción de los KEYWORDS para entrada de datos.....	52
Figura 5.3. Definición de las soluciones a modelar.....	52
Figura 5.4. Utilización del KEYWORD –INVERSE MODELING para la declaración de la modelación inversa entre dos soluciones.....	53
Figura 5.5. Declaración de los compuestos minerales ocupados en la modelación.....	54
Figura 5.6. Ejecución del archivo de entrada desde el botón 3x.....	55
Figura 5.7. Ejecución del archivo de entrada desde la barra de tareas.....	55
Figura 5.8. Representación del archivo de salida y resultados de concentración.....	56
Figura 5.9. Fracciones relativas de cada solución.....	57
Figura 5.10. Valores de transferencia molar.....	58
Figura 5.11. Reacciones Redox y límite de incertidumbre.....	59
Figura 5.12. Resumen de la modelación inversa.....	59
Figura 6.1.Ubicación: Parque Nacional "Lagunas de Montebello", Chiapas.....	60
Figura 6.2. Caracterización de lagos respecto a su afectación.....	61
Figura 6.3. Ubicación de los diferentes lagos (Caso de estudio).....	62
Figura 6.4. Mapa geológico de la cuenca.....	65
Figura 6.5. Mapa de unidades Geomorfológicas de la cuenca.....	67
Figura 6.6. Temperaturas promedio en la cuenca.....	68
Figura 6.7. Distribución promedio de la precipitación anual en la cueca.....	69
Figura 7.1. Puntos de muestreo con coordenadas en sistema UTM.....	73
Figura 7.2.Diagrama de Stiff lago: Balamtetic- Tepancoapan.....	76
Figura 7.3.Diagrama de Stiff lago: Vuleta el Agua.....	76
Figura 7.4.Diagrama de Stiff lago: San Lorenzo.....	77
Figura 7.5.Diagrama de Stiff lago: Yalmus.....	77
Figura 7.6.Diagrama de Stiff lago: Bosque Azul.....	77
Figura 7.7. Diagrama de Pipper y Hill comparativo.....	78
Figura 7.8. Sentido de flujo en lagos afectados.....	83

Introducción.

La realización de este trabajo, se justifica, en el estudio de uno de los lugares que constituyen uno de los ecosistemas más emblemáticos del estado de Chiapas y de México, pertenece al área natural protegida, denominada: Parque Nacional Lagunas de Montebello, creada a través del Decreto Presidencial publicado en el Diario Oficial de la Federación (DOF), desde 1959. Y que ha sido reconocida por organizaciones de nivel internacional, como la Convención sobre los Humedales realizada en Ramsar, Irán, en 1971, asimismo en la incorporación a la Red Mundial de Reservas de la Biosfera (RMBR) de la UNESCO (Zárate, 2015).

Un lugar de gran riqueza ambiental, que a pesar de los esfuerzos por su conservación y los reconocimientos, desde el año 2003, pobladores de las comunidades vecinas y autoridades han realizado diversas denuncias, por motivo del cambio de coloración, el mal olor y la alta mortandad de los peces en la serie de lagos abordada en este trabajo como son: Balamtetic, Vuelta el Agua, San Lorenzo y Bosque Azul (Zárate, 2015).

Por lo anterior diversas organizaciones en conjunto y de forma individual, como: la Comisión Federal de Electricidad (CFE), la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT), la Comisión Nacional de Áreas Naturales Protegidas (CONANP), la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), los diferentes órdenes de gobierno: municipal, estatal y federal, así como distinguidas universidades y grupos preocupados por la preservación del sitio, realizan con esfuerzo diversos estudios a fin de investigar a detalle las causas del problema, obteniendo como conclusiones de estos estudios, la afectación por descargas de sustancias químicas orgánicas, sedimentos, materias suspendidas y plásticos provenientes del río Grande de Comitán, así como la presencia de sulfuros producto de la descomposición de materia orgánica y valores indicativos de eutrofización. Todo lo anterior revela un grado de afectación alto y preocupante.

Se debe considerar que, en este lugar conviven la naturaleza y asentamientos humanos, que en su constante interacción con el agua, le otorgan características particulares, la geología del sitio compuesta por diferentes tipos de rocas, coeficientes de permeabilidad del acuífero, el tipo de flujo, su velocidad, así como la zona por donde se mueve el agua, inciden directamente en el tiempo de contacto entre el agua y el mineral encontrado en las diferentes formaciones rocosas, así como elementos provenientes del impacto antropogénico que posiblemente se relacionen con el problema encontrado en sitio (Mora Palomino et al., 2017).

Debido a la problemática actual, es de primera necesidad la utilización de herramientas que permitan, conocer los principales procesos hidrogeoquímicos, ocurridos durante la interacción agua-roca, y la importancia de cada uno de ellos

dependiendo de las características del sitio donde dicha agua se contiene o fluye (Fagundo & González, 2012).

Por tal motivo, se emplea el modelado hidrogeoquímico, ya que es una herramienta, que permite conocer por medio de las características previamente determinadas por los análisis químicos correspondientes, los principales procesos hidrogeoquímicos ocurridos en la interacción agua-roca a través de un cauce superficial o subterráneo y en un cuerpo de agua donde éste líquido puede ser de recién infiltración o haber estado contenido o estancado por periodos prolongados de tiempo (Appelo & Postma, 2010).

El proceso de “simulación” para conocer los procesos hidrogeoquímicos, se permite cuando conocidas las características de cada cuerpo de agua, en cuanto a la cantidad contenida de minerales y compuestos de origen natural o artificial, se platean en PHREEQC, un software dedicado a calcular el balance molar por medio de ecuaciones de balance, llevando a cabo cálculos con incertidumbres pequeñas que le permiten conocer al modelador los procesos de cada una de las fases a evaluar para después compararlas con el medio que rodea al cuerpo de agua, el tipo de suelo o formación geológica donde se mueve y poder concluir si el agua ha seguido un proceso natural que ha dado como lugar la disolución o precipitación de ciertos minerales o si la actividad química y/o biológica está siendo afectada hipotéticamente por la actividad humana que en la mayoría de los casos es producto de las reacciones de oxido-reducción a consecuencia de los altos contenidos de materia orgánica y la posible presencia de contaminantes (Parkhurst y Appelo, 1999; Fagundo & González, 2012).

Capítulo I. Objetivos y alcances.

I.I. Planteamiento del problema.

La región seleccionada para el caso de estudio, es una de las regiones que aunque intervenidas ya por diversas instituciones, actualmente carece de estudios que demuestren la complejidad de los posibles problemas y riesgos ambientales que representan las aguas que desembocan en este sistema lagunar.

Es por esto, que, la utilización del modelado hidrogeoquímico en el campo de la ingeniería civil, en la disciplina ambiental, es una herramienta que puede proporcionar resultados entendibles y de utilidad, haciendo amplio uso de la aplicación de los conceptos de la Química para entender la redistribución de los elementos y compuestos químicos, a través de los medios natural y antropogénico haciendo énfasis en los procesos hidrogeoquímicos que ocurren en la fase acuosa.

Así, con la utilización del modelado inverso asistido por software, pueden inferirse las reacciones ocurridas entre la relación agua-roca de condiciones conocidas después de reaccionar, que permiten valorar entre otras cosas, el riesgo por contaminación sobre los recursos hídricos, las alteraciones en la calidad del agua, las fuentes, rutas y destino de los contaminantes, así como las transformaciones químicas de las sustancias. Tomando en cuenta la complejidad conceptual de los fenómenos hidrogeoquímicos y a un costo menor comparado con llevar a cabo este estudio de forma manual.

Por lo anterior, se plantean los siguientes objetivos e hipótesis, que contribuirán al conocimiento de tales características abriendo una posible línea de investigación que permita tener más conocimiento del área de estudio.

Hipótesis:

La redistribución de los elementos y compuestos químicos a lo largo del cauce que conecta los diferentes lagos, así como las condiciones físicas de sitio, influyen directamente en los resultados de la modelación hidrogeoquímica inversa, propiciando que los procesos hidrogeoquímicos predominantes presenten variaciones significativas en los resultados.

Objetivos:

I.II. Objetivo general.

Identificar los procesos hidrogeoquímicos predominantes en el sistema lagunar Montebello, mediante la modelación inversa en PHREEQC, con base en una campaña de muestreo realizada “*in situ*”, en agosto de 2014 por el Instituto de Geología de la UNAM.

I.III. Objetivos particulares.

- Investigar los campos de aplicación de la modelación hidrogeoquímica inversa en reportes y artículos nacionales e internacionales de casos de estudios similares.
- Ejemplificar el proceso de modelación, mediante la utilización del software PHREEQC.
- Recabar información acerca del sitio, abarcando sus condiciones geográficas, geológicas, clima, flora y fauna, en medios impresos y digitales.
- Realizar la modelación hidrogeoquímica inversa en el caso de estudio seleccionado mediante el software PHREEQC.
- Relacionar los principales procesos hidrogeoquímicos determinados por la modelación inversa con las condiciones de sitio.
- Comparar los procesos hidrogeoquímicos resultantes con las condiciones del sitio.

I.IV Alcances:

Se comprenderá la dinámica química que opera en las interacciones agua-roca, para conocer las transformaciones químicas de las sustancias, posibles fuentes, rutas y destino de los elementos y compuestos químicos.

Se considerarán las lagunas Balamtetic, Vuelta el Agua, San Lorenzo y Bosque Azul, las cuales en referencia a un estudio previo (modelado directo), arrojan la mayor cantidad de elementos con altas concentraciones.

Se empleará la base de datos realizada a partir de la campaña de muestreo, llevada a cabo por el Instituto de Geología de la UNAM en el mes de agosto de 2014.

Se ejemplificará y realizará la modelación hidrogeoquímica inversa en el software PHREEQC, siendo este la herramienta con mejores condiciones para la realización de la modelación.

Capítulo II. Marco teórico.

II.I. Suelo.

El suelo es la capa superficial que recubre a la Tierra, la cual está compuesta por una fase sólida, líquida y gaseosa. El suelo es un medio poroso y abierto, en el cual se dan constantes interacciones químicas, físicas y biológicas. Los tamaños de grano que se pueden encontrar en un suelo son arenas, limos y arcillas (Olea , 2015).

II.I.1. Propiedades y tipos de suelo.

Manteniendo la afirmación de que el suelo es un sistema abierto, éste, intercambia materia y energía con el entorno hasta llegar a ser una formación de diferentes sustancias, tanto orgánicas como inorgánicas, en cualquiera de las siguientes fases: sólida, líquida o gaseosa, producto de su desarrollo estructural, dado que en él se presentan fenómenos biológicos, geológicos e hidrológicos, producidos por una continua influencia de organismos y la precipitación y lixiviación de los productos derivados de las diferentes reacciones que en él ocurren (Sposito, 1989).

Existen principalmente dos grupos de erosión que producen las reacciones en el suelo: por desintegración mecánica y descomposición química, la primera dada por el intemperismo y la segunda por la acción de agentes que atacan a las rocas modificando su constitución mineralógica (Juarez & Rico, 1969).

II.II. Mineral.

Se le conoce como una sustancia inorgánica y natural, con características que van desde: el color, el lustre, la tonalidad de sus raspaduras y su densidad, propias de su estructura interna, siendo esta, el factor más importante para condicionar sus propiedades físicas, algunos de estos minerales como: feldespatos, óxidos y carbonatos son los principales formadores de suelos (Juarez & Rico, 1969).

II.III. Rocas.

Se encuentran en la naturaleza como agregados duros y compactos, que contienen partículas minerales con fuertes uniones cohesivas permanentes, donde la proporción de los minerales contenidos, la estructura granular, textura y el origen de su formación sirven para la clasificación geológica de este sistema que llega a considerarse continuo (González de Vallejo et al., 2002).

Las características propias de una roca, tanto físicas como mecánicas, se conocen debido a que generan mecanismos y superficies de fractura en los procesos de formación, tienen módulos de deformación altos si se les compara con el suelo y

tienen una baja permeabilidad haciendo también en este último punto una comparación con el suelo (González de Vallejo et al., 2002).

Tratándose de los procesos químicos ocurridos en el macizo rocoso, estos se dan en presencia de agua, y están controlados por la temperatura, siendo más intensos y rápidos en regiones climáticas húmedas que en zonas de climas secos. Cada reacción da lugar a la formación de nuevos minerales o compuestos a partir de los existentes, dichos procesos son conocidos, como: Disolución, Hidratación, Hidrólisis y Oxidación-Reducción (González de Vallejo et al., 2002).

II.IV. Agua.

El agua es la única sustancia que cambia sus tres fases de manera natural, sólida, líquida y gaseosa, debido a las temperaturas encontradas normalmente en la Tierra, manteniéndose en constante cambio y en movimiento siempre, en la escala Celsius presenta a 0 °C su punto de congelamiento y a 100 °C el punto de ebullición a nivel del mar, cambiando su densidad, ya que al estar en su forma sólida es menos densa que al estar en forma líquida, por eso el hielo puede flotar (USGS, 2017).

Tiene también una tensión superficial muy alta, lo que la lleva a ser pegajosa y elástica propiciando así una fácil unión con gotas en lugar de separarse en una capa delgada y fina, siendo ésta la responsable también de la acción capilar, que permite el movimiento y la disolución de sustancias a través de las raíces de plantas y a través de los pequeños vasos sanguíneos del cuerpo humano (USGS, 2017).

La forma de describir la composición química del agua, que ha pasado a ser conocimiento de dominio público, en fase de vapor, la molécula de dicho compuesto corresponde a la forma más sencilla H_2O , que geométricamente presenta una forma triangular abierta, el átomo de oxígeno ocupa el vértice y está unido a los átomos de hidrógeno, que a su vez no están unidos entre sí como se observa en la figura 2.1. (Fagundo & González, 2016). Sin embargo, en fase líquido el agua está compuesta por moléculas sencillas, conteniendo esta formaciones complejas, cuya fórmula es $(H_2O)_x$, donde $x = 2, 3, 4$, etc. (Milán, 2015).

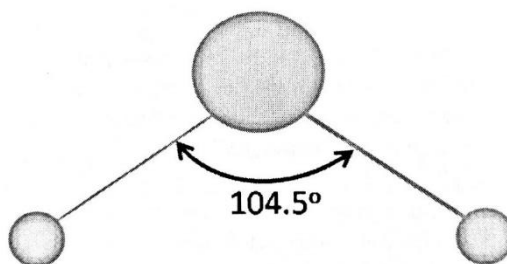


Figura 2.1 Estructura molecular del agua.
Fuente: (Milán, 2015).

Los agregados moleculares se encuentran formándose y disociándose continuamente, por lo cual dicho fenómeno puede ser expresado mediante la ecuación 2.1. (Milán, 2015).



El factor más importante de esta asociación es la formación de los llamados enlaces de hidrógeno, que son producto del resultado de las fuerzas de cohesión entre el hidrógeno y una molécula y el oxígeno de otra molécula, un ejemplo de este párrafo se muestra en la figura 2.2. (Milán, 2015).

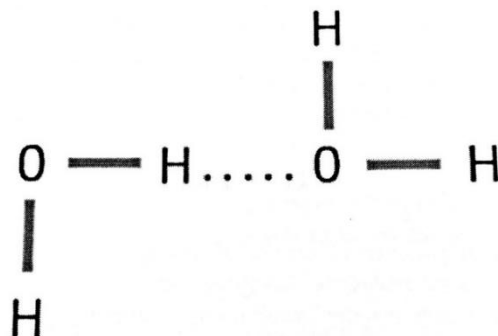


Figura 2.2 Esquema de asociación de moléculas de agua.

Fuente: (Milán, 2015).

II.IV.1. Propiedades físicas y químicas del agua.

Las propiedades físico-químicas de un agua natural, al ser determinadas, representan una herramienta para cada uno de los especialistas que la estudian, así que cada propiedad física y química, hacen este líquido tan singular y necesario para todas las cosas vivas, que posee cualidades de gran interés y es digno de ser estudiado.

II.V. Parámetros principales.

Entre las propiedades más relevantes de las aguas, mencionando lo más importante de su evolución natural, se encuentran:

Temperatura.

La temperatura del agua se establece por la absorción de radiación en las capas superiores del líquido, la variación de esta propiedad afecta directamente a la solubilidad de sales y gases en el agua y en general a todas sus propiedades, tanto químicas como microbiológicas, dando como resultado una variación de temperaturas en un cuerpo de agua, dependiendo del terreno, naturaleza de las rocas y la profundidad (Marín, 2005).

Color.

Las sustancias existentes en suspensión o disueltas y que poseen color, como, materias orgánicas procedentes de la descomposición de vegetales, así como los diversos productos y metabolitos orgánicos habitualmente encontrados, o como en el caso de lagos y embalses donde suele existir una relación directa entre color y pH, siendo estos directamente proporcionales, le otorgan al agua un cierto color (Marín, 2005).

Olor-Sabor.

La fuente de estas características, proviene del medio natural o artificial. Del origen natural, se incluyen: gases, sales, compuestos inorgánicos, compuestos orgánicos y compuestos procedentes de la actividad vital de los organismos acuáticos. Para el caso de los artificiales, estos, pueden ser también compuestos orgánicos e inorgánicos y pueden definirse con mayor facilidad al identificarse la fuente productora del problema (Marín, 2005).

Dureza

La cantidad de los iones metálicos que contiene el agua en forma de carbonatos y bicarbonatos, encontrando en su mayor parte iones de calcio y magnesio, las unidades para determinar la dureza del agua se expresan en ppm (partes por millón) como CaCO_3 , siendo este producto, la suma de calcio y magnesio expresado en dichas unidades, destacando que la presencia en cantidades considerables, no es deseable para el uso industrial, doméstico y es nocivo para el ser humano (Milán, 2015).

Potencial de Hidrógeno pH.

Término con el que se refiere a la intensidad de la condición de acidez o alcalinidad de una solución.

Al encontrarse el agua en forma pura, la concentración de los iones hidrogeniones $[\text{H}^+]$ es igual a la concentración de los iones hidroxilo $[\text{OH}^-]$ debido a la disociación molecular de agua el pH, se ubica en un valor de 7, que ha sido definido por la siguiente ecuación (ecuación 2.2.): (Milán, 2015).

$$\text{pH} = -\log[\text{H}^+] = -\log[10^{-7}] = 7 \quad (2.2.)$$

Aunque las sustancias disueltas en el agua pueden alterar este equilibrio por la disociación de las mismas, lo que puede resumirse a que cuando se agregan iones $[\text{OH}^-]$, el agua se torna muy básica, en contraste de cuando se agregan iones $[\text{H}^+]$ la solución se torna ácida, aunque sustancias como la calcita CaCO_3 puede quitar iones oxidrilos o hidrogeniones, dando como resultado un exceso de iones hidroxilo que provocan que la solución se vuelva alcalina (Milán, 2015).

Si al agua, se le concede el tiempo necesario, ésta, podrá disolver cualquier sustancia inorgánica, lo que propicia que los nutrientes necesarios para la vida se puedan aprovechar, ya que muchos elementos están disueltos en el medio

acuoso, esto debido a que las moléculas de agua tienen una función especial y son capaces de penetrar en la partícula sólida, separando una de otra y rodeándolas con una capa que les impide volver a agruparse como puede observarse en la figura 2.3.

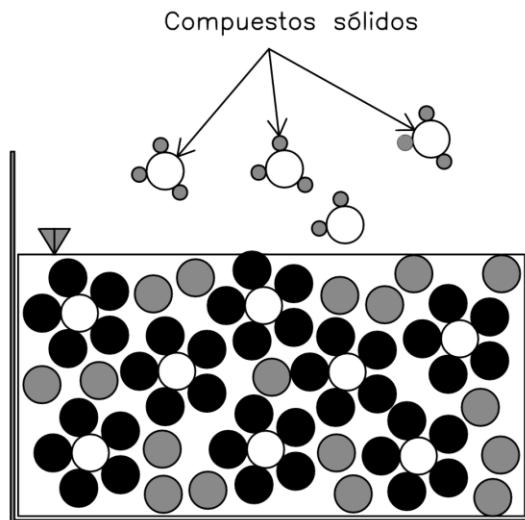


Figura 2.3. Disolución de una sustancia.
Fuente: (Milán, 2015)

Aunque el agua también es capaz de disolver gases y otros líquidos, disolviendo algunos en forma directa o por reacción química, como el CO_2 , el NH_3 y el H_2S (Milán, 2015).

II.VI. Análisis químico del agua.

La preparación y la toma de muestra es el inicio para realizar un análisis químico (Milán, 2015), en este caso, se realizó de acuerdo con las recomendaciones presentadas en la guía de muestreo de la CONAGUA, 1999, así como los laboratorios que se encargarían de su análisis (Olea, 2015).

Para cada análisis químico realizado, la precisión de éste se puede controlar comprobando que la diferencia entre aniones y cationes, no exceda cierto valor, ya que si en el balance se presentara una diferencia de magnitud importante, puede tratarse de un error en la determinación de los macrocomponentes, o debido a que no fue tomado en cuenta algún componente, esto a causa de haberse presentado en condiciones anormales, o en cantidades menores (Milán, 2015; Fagundo & González, 2016).

Un análisis completo, lo componen las determinaciones de los llamados macrocomponentes, entre ellos se encuentra el calcio (Ca^{2+}), magnesio (Mg^{2+}), sodio (Na^+), bicarbonato (HCO_3^-), sulfato (SO_4^{2-}) y cloro (Cl^-), y algunos que pueden ser obtenidos en menores cantidades, encontrándose, potasio, hierro, manganeso, carbonatos, hidróxidos, fosfatos, nitritos, nitratos, además se pueden

documentar otras propiedades como: dureza total, alcalinidad y cloros, entre otros. (Milán, 2015)

La ecuación de balance siguiente, es una manera de saber si el análisis llevado a cabo en el laboratorio es confiable (Fagundo & González, 2016).

$$e = \frac{\sum_{i=1}^n \text{Cationes} - \sum_{i=1}^n \text{Aniones}}{\sum_{i=1}^n \text{Cationes} + \sum_{i=1}^n \text{Aniones}} * 100\% \quad (2.3.)$$

Donde, e : Error, en %.

Para casos estrictos, en aquellas operaciones, cuyo producto rebase los 10 puntos porcentuales (10%), será necesario repetir el análisis o desechar la muestra, también puede llevarse a cabo esta comprobación comparando la conductividad eléctrica real y la teórica (Milán, 2015).

II.VI.1. Iones.

Aunque la cantidad de las aguas naturales puede rebasar hasta 60 constituyentes encontrados en forma natural, en los análisis químicos, sólo se llegan a determinar entre 10 y 20 parámetros considerados como fundamentales (I.G.M.E., 1985).

El agua como disolvente universal y sus propiedades de combinación, permite que se encuentre una extensa variabilidad de los elementos presentes en concentraciones que dependen del sitio de muestreo, estos con el paso del tiempo por su frecuencia de aparición y el valor de concentración, han constituido la clasificación de Freeze and Cherry. A continuación se enlistan algunos de estos constituyentes químicos (I.G.M.E., 1985).

Constituyentes en mayoría o fundamentales:

Aniones:

HCO_3^- (Bicarbonatos), CO_2 (Acido Carbónico), y CO_3^{+} (Carbonatos)

Proviene principalmente de la disolución de CO_2 que existe en la atmósfera y de los carbonatos, otros aportes de carbonatos y bicarbonatos llegan a darse principalmente por la disolución de calizas y dolomías, cada uno de estos procesos tiene relación directa con el nivel de pH, ya que si los iones dan alcalinidad al agua y consumen los ácidos, se crea una solución tampón lo que los vuelve inoxidables y no reducibles, provocando que se precipiten en forma de CaCO_3 (Custodio & Llamas, 2001; Milán, 2015).

Cl^- Cloruros

Proviene principalmente de formaciones evaporíticas, rocas de origen marino y agua de lluvia, (I.G.M.E., 1985). Aunque su fuente artificial tiene lugar en las aguas negras procedentes de la industria y las ciudades que aportan este ion a las aguas naturales (Milán, 2015).

Su concentración es variable, por lo que puede encontrarse en cantidades que van desde las 100 ppm hasta las 1500 ppm, resultando que al alcanzar las 250 ppm pueda ser percibido el sabor que este le agrega, y según la NOM-127-SSA1-1994, la concentración máxima permisible para uso y consumo humano es de 600 ppm (OMS, 2003).

SO_4^{2-} Sulfatos

La descomposición de sustancias orgánicas de origen tanto vegetal como animal, aportan importantes cantidades de este ion al agua, sin embargo el principal aporte es dado por la disolución de yeso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) y anhidrita (CaSO_4), (I.G.M.E., 1985). La presencia de este ion en las aguas naturales por encima de las 500 ppm también pueden causar un sabor notable y en concentraciones mayores a las 1000 ppm, tienen un efecto laxante en los seres humanos (OMS, 2003).

Cationes:

Calcio Ca^{2+}

La concentración máxima permitida en el agua potable de este ion, de acuerdo con la Comisión Nacional del Agua, CONAGUA, es de 200 ppm, para poder ser ingerida, aunque en aguas de terrenos yesíferos, pueden llegar a las 600 ppm, debido a que el calcio es uno de los cationes con más abundancia en las aguas naturales, teniendo la propiedad de ser muy soluble por lo que se puede precipitar con facilidad en carbonato, apareciendo así en rocas como la calcita, dolomita o como sulfato en rocas como el yeso y la anhidrita (Milán, 2015; I.G.M.E., 1985).

Magnesio Mg^{2+}

Por lo contrario al ion anterior, este ion es menos abundante en aguas naturales y dependencias oficiales, han determinado una concentración máxima permisible en el agua potable de 150 ppm para poder ser ingerida, procede de la disolución de rocas con altos contenidos de carbonatos, como: dolomías, calizas magnesias, evaporitas y rocas de aguas marinas, en esta última, las relación entre Ca^{2+} y Mg^{2+} es de 1:5 y en terrenos evaporíticos puede alcanzar valores de concentración de hasta 1,000 ppm (I.G.M.E., 1985; Milán, 2015).

Sodio Na^+

En altas concentraciones este ion puede dar lugar a un sabor inaceptable y las concentraciones máximas permisibles en agua potable son de 200 ppm (OMS, 2003). Su origen en aguas naturales, se debe a la meteorización de silicatos y la disolución de rocas sedimentarias de origen marino, las sales de Na^{2+} son muy solubles y raramente precipitan de sus disoluciones (Milán, 2015; I.G.M.E., 1985).

Como componentes menores o secundarios, basados en la clasificación de Freeze and Cherry, se encuentran:

Potasio K^+

No se considera tóxico para el ser humano, y es un ion vital para las plantas y la actividad agrícola (Milán, 2015). Procede de la meteorización de feldspatos y en ocasiones de la solubilización de depósitos de evaporitas, aunque puede ser fijado irreversiblemente en procesos de formación de arcillas y de adsorción en las superficies de minerales con alta capacidad de intercambio iónico (I.G.M.E., 1985).

Nitrato NO_3^- , Nitrito NO_2^- y Amonio NH_4^+

Estos compuestos, así como otros compuestos nitrogenados relacionados al ciclo del nitrógeno, el primero se encuentra en el medio ambiente y es un nutriente importante para las plantas, y en el caso del nitrito, no suele presentarse en concentraciones significantes (OMS, 2003). Aunque su formación se atribuya a la descomposición de materia orgánica, también puede aparecer por la actividad antropogénica, como filtraciones o fugas provenientes de granjas, jardines, actividad agrícola y por contaminación proveniente de basureros a cielo abierto y otros tipos de contaminación de las aguas naturales de la zona (Milán, 2015).

Según la NOM-127-SSA1-1994 el máximo permisible para el nitrato es de 10 ppm y para el nitrito de 0.05 ppm, aunque en aguas no contaminadas el primero, no suele sobrepasar las 10 ppm (I.G.M.E., 1985).

Generalmente el NH_4^+ o el amoniaco libre, NH_3 , aparecen sólo como trazas en aguas subterráneas naturales, y su presencia en conjunto con los nitritos, no debe de considerarse como resultado de contaminación sin haber analizado antes las posibles causas de su presencia en el medio acuoso, debido a que pueden mantenerse durante un cierto tiempo en equilibrio con su forma oxidada, o sea el NO_3^- (I.G.M.E., 1985).

Hierro Fe^{2+}

El hierro, es un elemento esencial para llevar a cabo el proceso metabólico de animales y plantas, además, es uno de los metales más abundantes en la corteza terrestre, su nivel de concentración en el medio acuoso, se encuentra controlada por procesos de equilibrio químico, y puede presentarse como Fe^{3+} , $FeOH^{2+}$, $FeOH^+$ en función del pH y de los demás elementos que estén contenidos en el agua, como pueden ser carbonatos, bicarbonatos, sulfatos, etc. (USGS, 1962). Encontrando en normas oficiales, un máximo permisible de 0.3 ppm (OMS, 2003; Milán, 2015).

Manganeso Mn^{2+}

Su concentración también está regulada por la presencia de procesos de equilibrio químico en el agua, como: oxidación-reducción, precipitación y disolución de hidróxidos, carbonatos y sulfuros, formación de materia orgánica, así como por la actividad metabólica de animales y plantas (Rojas Romero, 1996). Estudios recientes, dan como resultado que el nivel de concentración medio de este ion, en aguas superficiales es de 16 $\mu g/l$, (OMS, 2011) y según la NOM-127-SSA1-1994,

el máximo permisible para agua potable se encuentra en las 0.15 ppm (Milán, 2015).

Sílice H_4SiO_4 ó SiO_2

Es originado por los procesos de hidrólisis de feldespatos y silicatos en general en el medio acuoso, en los diferentes tipos de rocas sedimentarias, el Si, es predominante generado por el desgaste de las mismas, también se puede encontrar como $\text{SiO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ opal y calcedonia que se forman durante el proceso de diagénesis (Salminen, 2005). Aunque en aguas naturales, con frecuencia se encuentra como ácido silicio (H_4SiO_4), siendo su solubilidad prácticamente de forma independiente del pH, hasta que este último alcanza un valor de 9 (Milán, 2015; I.G.M.E., 1985).

II.VII. Clasificación de los tipos de agua por su composición química.

Una forma acertada de poder estudiar las propiedades del agua, basado en el estudio de análisis químicos, puede simplificarse en gran parte con el empleo de diagramas y gráficos, mayormente aceptados cuando se intenta hacer una comparación entre varios análisis de un mismo sitio en épocas diferentes o bien, en sitios diferentes durante una misma época. Sobre todo si las representaciones tienen por objeto resaltar la composición iónica del agua para permitir compararlas con otras aguas con los diagramas en sus diferentes variantes (Milán, 2015).

Aunque no todo se basa en diagramas y gráficos, por ejemplo la representación y clasificación según Alekin, es una representación que tomando en cuenta los tres aniones más importantes que son los que le dan la clase al agua: (Bicarbonatadas ($\text{HCO}_3^- + \text{CO}_3^{2-}$), Cloruradas (Cl^-) y sulfatadas (SO_4^{2-}) representadas por las letras “C”, “Cl” y “S” respectivamente, dicha representación permite tener un conocimiento del medio por el cual el agua transita, el tipo de roca que está lixiviando, las aguas que son de recién infiltración o si hay ahí una zona de recarga, dicha descripción se representa en la figura 2.4. (Milán, 2015).

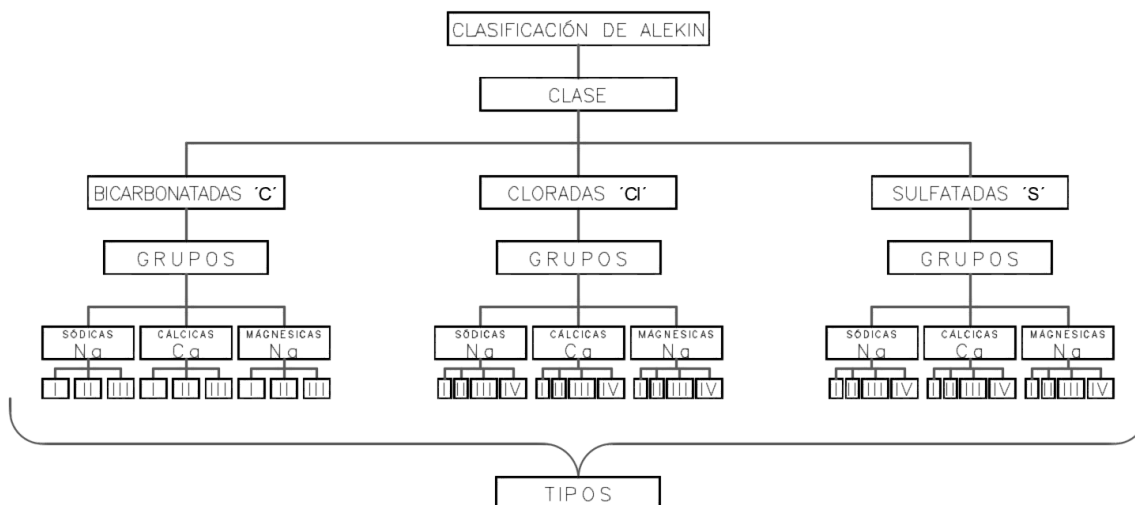


Figura 2.4. Clasificación de familias de aguas según Alekin (1957).
Fuente: (Milán, 2015).

Para obtener el tipo de agua a la que pertenece, debe de recurrirse a las siguientes relaciones hidrogeoquímicas, de las cuales:+

Tipo I. $r\text{HCO}_3^- > r\text{Ca}^{2+} + r\text{Mg}^{2+}$

Agua dulce de reciente infiltración, donde los equivalentes por millón (r) del anión bicarbonato es mayor a la suma de los cationes de calcio y magnesio. Es posible que se encuentren en áreas de recarga (Milán, 2015).

Tipo II $r\text{HCO}_3^- < r\text{Ca}^{2+} + r\text{Mg}^{2+} < r\text{HCO}_3^- + r\text{SO}_4^{2-}$

Se encuentran en circulación por rocas sedimentarias, pueden ser dulce o incluso tener sabor si circula por yesos o evaporitas. En este caso, las ppm (r) del anión bicarbonato es menor a la suma de los cationes en ppm (r) de calcio más el magnesio, pero a su vez menor a la suma de los aniones en ppm (r) del bicarbonato y sulfato (Milán, 2015).

Tipo III $r\text{Cl}^- > r\text{Na}^+ \quad \text{ó} \quad r\text{CO}_3^{2-} + r\text{SO}_4^{2-} < r\text{Ca}^{2+} + r\text{Mg}^{2+}$

Estas pueden ser aguas con intrusión marina en acuíferos costeros, proveniente de un cuerpo de agua salada, (laguna o contaminación antrópica), producto de lixiviación de rocas ígneas o metamórficas y aguas aisladas muy mineralizadas (Milán, 2015).

Tipo IV

Aguas que no contienen el anión bicarbonato (HCO_3^-), son aguas acidas y pueden relacionarse con un ambiente volcánico activo, también puede ser agua de lluvia o producto de contaminación antrópica (Milán, 2015).

II.VII.1. Diagramas de Stiff.

En el caso de los diagramas para la clasificación y conocimiento de los tipos de agua, pueden presentarse tanto en columna o barra y de forma circular, ejemplo representado en las figuras 2.5. y 2.6., y también en diagrama de Stiff como representación de la composición química del agua, son de gran utilidad cuando se quiere comparar y apreciar de forma rápida los diferentes tipos de agua, también son de ayuda cuando se necesita apreciar la variación de la composición química en distintas profundidades a través de un pozo en un tiempo determinado, debido a condiciones climáticas, hidrogeológicas o a efectos antrópicos (Fagundo & González, 2016).

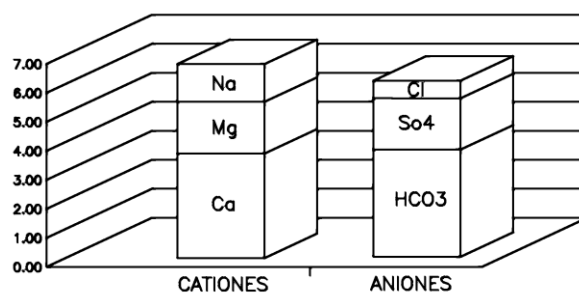


Figura 2.5. Diagrama columnas de Collins en epm.
Fuente: (Milán, 2015).

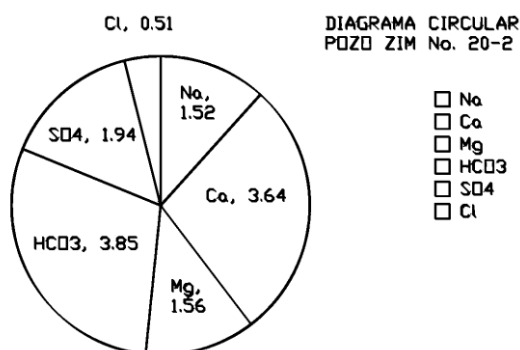


Figura 2.6. Diagrama circular en epm.
Fuente: (Milán, 2015).

La estructura del diagrama de Stiff, consiste en colocar en los ejes de la izquierda las concentraciones en (meq/L) de los iones $\text{Na}^+ + \text{K}^+$, Ca^{2+} , y Mg^{2+} , de arriba hacia abajo, y siguiendo el mismo orden, en los ejes de la derecha, colocar los iones Cl^- , $\text{HCO}_3^- + \text{CO}_3^{2-}$ y por último el SO_4^{2-} . Esto puede observarse en la figura 2.7. (Fagundo & González, 2016).

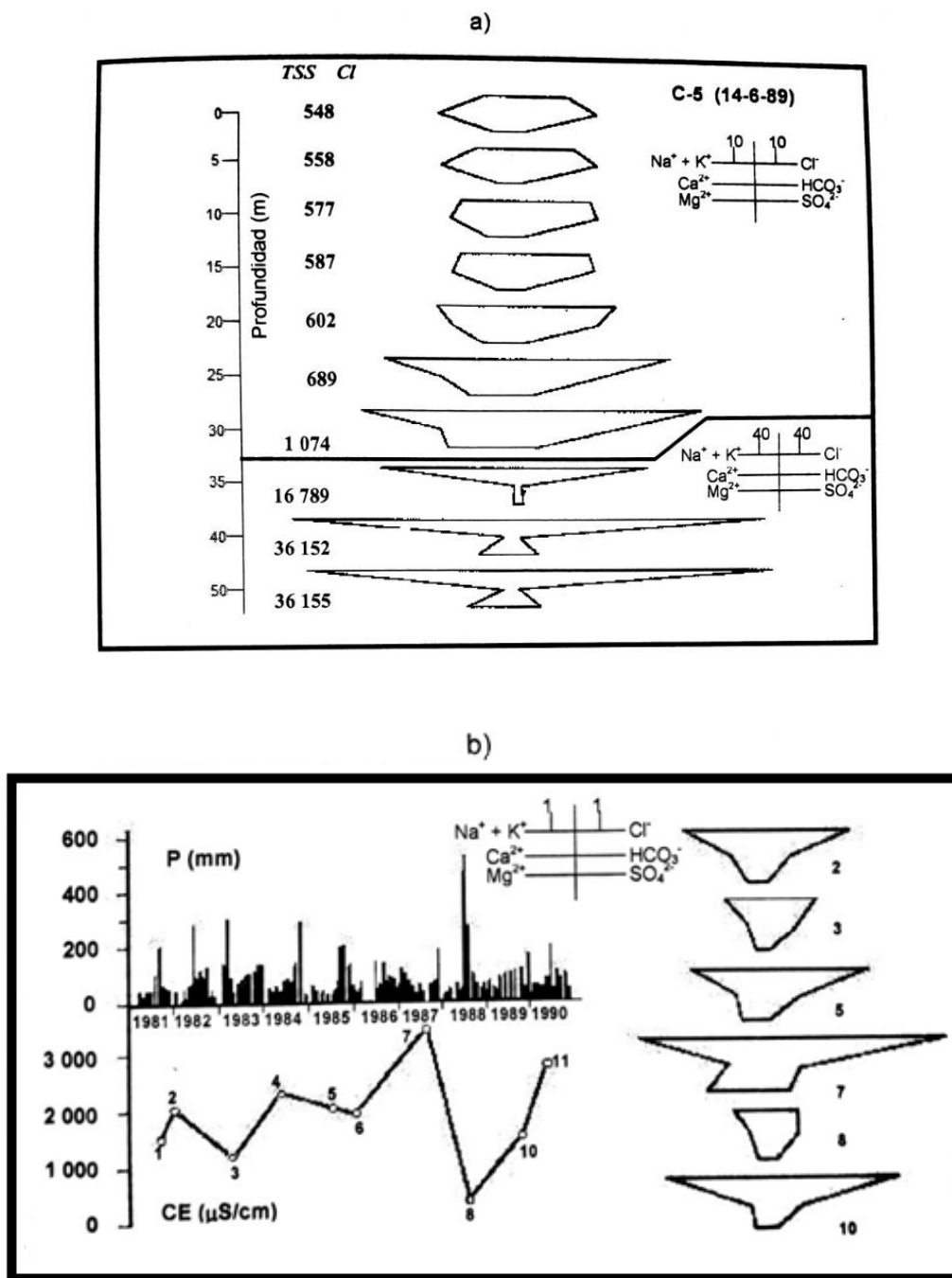


Figura 2.7(a y b). Representación de la composición química de aguas salinizadas mediante diagramas de Stiff.

Fuente: (Fagundo & González, 2016)

II.VII.2. Diagramas de Piper y Hill.

Este tipo de diagrama, tiene la ventaja de permitir representaciones de un gran número de muestras en un solo gráfico y está basado en el empleo de triángulos equiláteros, donde los triángulos de aniones y cationes, ocupan los ángulos inferiores izquierdo y derecho con sus bases alineadas, en la parte central se encuentra un rombo y sobre este se proyectan los puntos de cada uno de los triángulos por medio de una recta al borde superior del rombo, como se observa en la figura 2.8. (Fagundo & González, 2016).

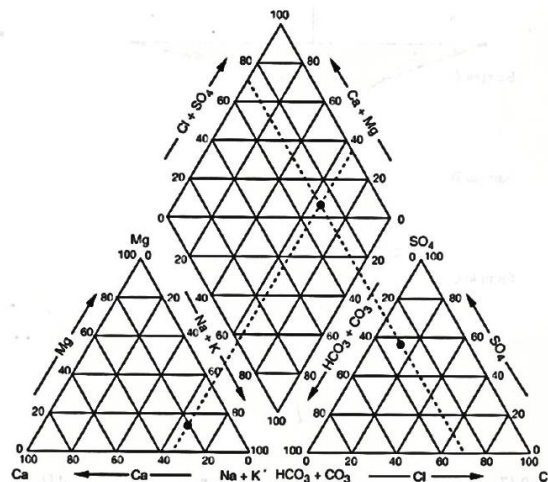


Figura 2.8. Diagrama de Piper-Hill-Langelier.
Fuente: (Fagundo & González, 2016)

El rombo central a su vez se divide en cuatro rombos pequeños e iguales y según donde se encuentre la muestra o muestras, será la clasificación a la que el agua pertenezca, pudiendo ser cualquiera de los siguientes cuatro tipos: (Milán, 2015).

1. En el rombo superior, las aguas son de tipo sulfatadas y/o cloruradas, cálcicas y/o magnésicas.
2. En el rombo inferior las aguas son de tipo bicarbonatadas sódicas.
3. En el rombo central izquierdo, las aguas son de tipo bicarbonatadas cálcicas y/o magnésicas.
4. Y en el rombo central derecho, las aguas son de tipo clorurada y/o sulfatada sódicas.

II.VII.3. Representación geoestadística (SIG).

Todo el trabajo realizado y documentado, es mayormente entendido si se representan cada una de sus variables en forma espacial, esta necesidad ha permitido la creación de mapas de contenidos iónicos y otras propiedades hidrogeológicas que son distribuidas en un espacio de dos dimensiones, todo esto basado en métodos geoestadísticos, ejemplo demostrado en las figuras 2.9. y 2.10. (Fagundo & González, 2016).

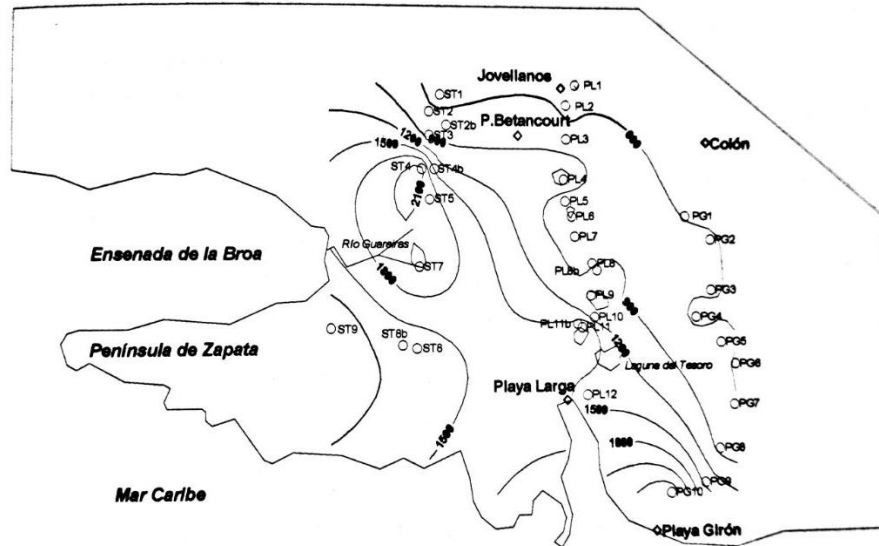


Figura 2.9. Mapas de isólinas de conductividad eléctrica.
Fuente: (Fagundo & González, 2016).

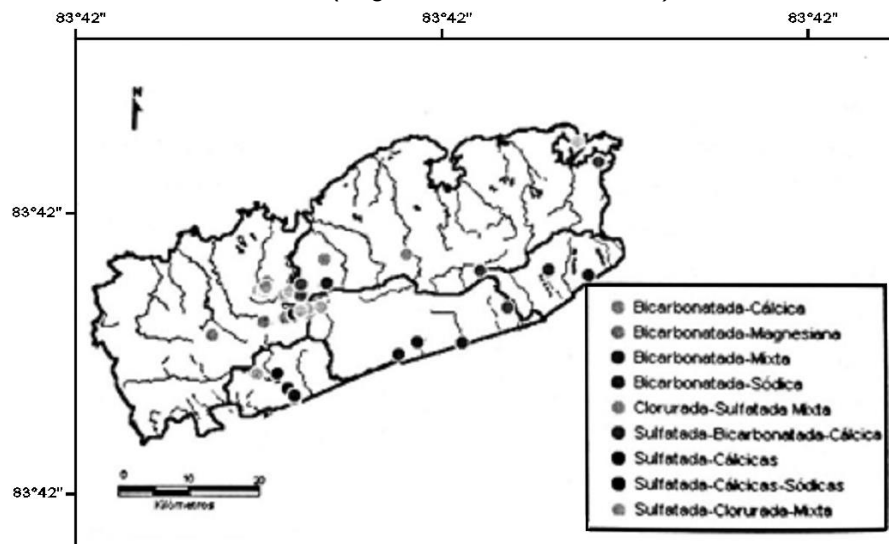


Figura 2.10. Distribución espacial de los tipos hidroquímicos de aguas.
Fuente: (Fagundo & González, 2016).

Capítulo III. Hidrogeoquímica.

III.I. Antecedentes.

La Hidrogeoquímica definida por Appelo y Postma en 1993, se enfoca en conocer la composición de agua mediante análisis químicos que involucran procedimientos analíticos, considerando temas como: trabajos de muestreo, unidades y terminología. Y aunque tiene ya una gran aplicación en otros campos, para fines de este trabajo, sólo se tomarán en cuenta los procesos hidrogeoquímicos que originan la composición química del agua, analizando cada componente y sus propiedades para saber o suponer sobre el comportamiento de las sustancias disueltas en el medio acuoso (Fagundo & González, 2012; D. Hem, 1985).

Esta rama de estudio tiene su base en la hidrología, que hasta hace algún tiempo, se concentraban solo en las condiciones físicas del agua como sustancia compuesta por tres átomos (H_2O). Lo que indicaba que las impurezas encontradas en el líquido, no eran de mayor importancia a menos de que se tratara de estudios en donde las aguas presentaban una notable cantidad de materia disuelta, pero esto se consideró debería ser estudiado por otras disciplinas como la Geoquímica, la cual, describe a la hidrosfera como el contenido de toda el agua en sus tres fases alrededor de la Tierra y tiene identificadas las impurezas, a estos tiempos es de mayor interés conocer los procesos interrelacionados a la química del agua (Hidrogeoquímica), en relación al entorno que la rodea para así poder hablar o actuar de mejor manera en el control y mejora de la calidad del agua (D. Hem, 1985).

Cada proceso hidrogeoquímico es de importancia, ya que de estos depende la calidad química del agua subterránea, entre ellos, los principales son: el proceso de evaporación, transpiración, intrusión de agua de mar, intercambio cationico, disociación y precipitación de minerales, oxido-reducción y procesos biológicos pueden presentarse en la composición química del agua al mismo tiempo (Sheikhy, et al., 2014).

III.II. La Hidrología y el ciclo del agua en la naturaleza.

La Hidrología ha proporcionado, números porcentuales de la distribución de agua en el planeta como se observa en la tabla 3.1., y la Hidrogeología, rama de esta disciplina tiene datos más profundos de este tema que indican puntualmente con números porcentuales la distribución en la superficie, subsuelo y otras, como se muestra en la tabla 3.2.

Tabla 3.1. Distribución del agua en la Tierra de acuerdo con su naturaleza en porcentaje.

Agua de mar	97
Glaciales	2.4
Agua subterránea	0.54
Agua superficial	0.06
Agua atmosférica	0.001

Fuente: (Monsalve, 1999).

Tabla 3.2. Distribución en porciento del agua en la Tierra.

	Lagos de Agua Dulce	0.0171
Aguas Superficiales	Lagos salados y mares interiores	0.0009
	Ríos y canales	0.0001
	Agua vados (incluye humedad del suelo)	0.005
Aguas subterráneas	Agua subterránea almaceada hasta la profundidad de 1 km (aguas saladas)	0.33
	Agua subterránea más profundas (muy saladas no potable)	0.29
	Atmósfera	0.001
Otras aguas	Océanos	97.2
	Casquetes polares y glaciares	2.15

Antártica: 86%, Ártico: 13%, Otros glaciares: 13%

Fuente: (Fagundo & González, 2016).

La Hidrología ha acompañado al ser humano desde que las comunidades se asentaron cerca de los lagos y ríos con el fin de utilizar el agua para consumo humano, el riego de cultivos y medio de transporte. Por lo que desde entonces fueron construidas estructuras hidráulicas para el riego y otras actividades (Fagundo & González, 2012).

Los trabajos realizados por investigadores de los grandes periodos en la ciencia, culminaron con un paso fundamental atribuido a los trabajos de Henry Darcy (1803-1858), quien formuló la ley que lleva su nombre y se expresa de la siguiente manera: (Fagundo & González, 2012).

$$Q = K A I \quad (3.1.)$$

Donde:

Q : Caudal m³/s

K : Coeficiente de permeabilidad (m/s).

A : Superficie atravesada por el agua (m^2).

I : Gradiente hidráulico (determinado por la distancia recorrida por el agua i y la diferencia de altura del nivel freático h).

Así que al ser el ciclo del agua, el proceso por el cual el agua es evaporada desde los océanos, se condensa y se precipita sobre los continentes, y se distribuye por varios caminos, parte se detiene en el suelo y sirve para el consumo de los seres vivos, otra se infiltra para formar acuíferos y otra se convierte en escorrentía superficial, en todos los procesos y al tener contacto directo con la superficie de la Tierra, puede darse una actividad importante llamada transporte de sólidos (Monsalve, 1999).

Cuando la lluvia cae al suelo, ejerce una fuerza sobre las partículas, capaz de removerlas de sus posiciones originales y llevarlas a otros lugares, generalmente las transporta a lugares más bajos por medio de corrientes, las cuales también generan una acción erosiva en sus canales, lo cual propicia que se den dos tipos de arrastre, uno en suspensión y otro junto al fondo, aunque no es posible determinar las cantidades de cada uno de ellos en una corriente, al llegar a desembocar ésta en un embalse, los sedimentos en suspensión se depositan, la cantidad de sedimentos que se depositen está totalmente relacionada con el tamaño del embalse, siendo que a mayor tamaño, mejor retención de sedimentos (Monsalve, 1999).

Se estima que cada año, en la superficie terrestre caen alrededor de $520,000 \text{ km}^3$ de precipitación, misma cantidad que año con año es evotranspirada (Fagundo & González, 2012).

III.III. Adquisición de la composición química del agua.

A la vez que el agua es infiltrada con características químicas ya definidas que tuvieron lugar en la atmósfera o en la superficie del terreno por evotranspiración, sufre modificaciones importantes y drásticas en su composición, debido a un conjunto de interacciones físicas, químicas y biológicas complejas con el medio en el que se mueve (I.G.M.E., 1985).

Por estas interacciones y diversos factores como los geológicos, geomorfológicos, hidrogeológicos y otros, que provocan el modo en que el líquido adquiere su calidad hidroquímica, se consideran sólo el conjunto de sustancias en su mayoría inorgánicas que han sido incorporadas al agua por procesos naturales debido a su elevado poder disolvente y a sus propiedades de combinación (Fagundo & González, 2012; Milán, 2015).

Aunque desde la interacción con materiales dispersos en la atmósfera el agua ya adquiere una primera modificación química, es hasta la interacción con el suelo, la zona no saturada y el acuífero donde se le aportará al agua su contenido iónico (Fagundo & González, 2012; Milán, 2015).

El agrietamiento y la porosidad de las rocas influyen de manera determinante en este proceso, ya que influyen en el estado de división de las partículas, así mientras más pequeñas sean éstas, poseerán mayor superficie y se facilitará la disolución del mineral. En el caso de las rocas sedimentarias los minerales que pueden ser solubilizados con mayor facilidad, son: sílice, calcita, dolomita, anhidrita, yeso, caolinita, halloysita, montmorillonita, etc. Puede haber también carbonatos y sulfatos de manganeso, zinc, estroncio, entre otros (Fagundo & González, 2012; Milán, 2015).

Cuando se trata de aguas naturales no contaminadas, actualmente se han definido rangos de concentraciones normales como se puede ver en la tabla 3.3. Pero las condiciones antropogénicas pueden cambiar completamente la calidad del agua, debido principalmente a las aportaciones dadas por descargas de drenajes industriales y domésticos, así como el uso de plaguicidas en el sector de la agricultura y la lluvia ácida (Appelo & Postma, 2010).

Tabla 3.3. Rangos de concentración normales en aguas no contaminadas y las diferentes fuentes de los elementos.

Elemento	Concentraciones (mmol/L)	Fuente
Na ⁺	0.1-2	Feldespato, Roca salina, Zeolita, Atmosfera, Intercambio de cationes
K ⁺	0.01-0.2	Feldespato, Mica
Mg ²⁺	0.05-2	Dolomita, Serpentina, Pyroxeno, Anfíbol, Olivino, Mica
Ca ²⁺	0.05-5	Carbonato, Yeso, Feldespato, Pyroxeno, Anfíbol
Cl ⁻	0.05-2	Sal, Atmosfera
HCO ₃ ⁻	0-5	Carbonatos, Materia orgánica
SO ₄ ²⁻	0.01-5	Atmosfera, Yeso, Sulfitos
NO ₃ ⁻	0.00-0.2	Atmosfera, Materia orgánica
Si	0.02-1	Silicatos
Fe ²⁺	0-0.5	Silicatos, Siderita, Hidroxidos, Sulfitos
PO ₄	0-0.02	Materia orgánica, Fosfatos

Fuente: (Appelo & Postma, 2010)

III.IV. Leyes de la cinética química.

III.IV.1. Equilibrio Químico.

Cada uno de los procesos químicos tienen una evolución que va desde los reactivos, hasta la formación de productos, llevándose a cabo a determinadas velocidades que hacen que la reacción llegue a completarse, conocida como la velocidad de reacción para su composición, la ocupada también para su descomposición, misma que permite formar nuevamente los reactivos de los que los productos proceden. Infiriendo con ello la formación de un estado dinámico que permite a todas las especies reaccionantes mantener constante sus concentraciones (Gary, 2009).

Los equilibrios químicos llevados a cabo en el medio acuoso, incluyen las reacciones redox, ácido-base o complejos y producen los cambios de electrones, protones, iones o moléculas polares, pueden ocurrir, tanto de manera aislada como combinada y cuando son poco solubles, producen una serie de mecanismos que deben ser tomados en cuenta si se pretende tener una idea de cómo el agua adquiere su composición química natural a lo largo del tiempo (Fagundo & González, 2012).

Con referencia a la acción de masas descrita por Guldberg y Waage, se describe que la rapidez de una reacción química es proporcional a las “masas activas”, abarcando tanto concentraciones como presiones, para poder apoyar esta idea, se derivó una constante de equilibrio, definida como la condición en la cual la rapidez de las reacciones para la composición de productos y el sentido inverso sea igual (Gary, 2009).

Considerándose la siguiente reacción química, descrita por la ecuación 3.2.:



De acuerdo con Guldberg y Waage, la reacción hacia adelante es igual a una constante por la concentración de cada especie elevada a la potencia del número de moléculas que participa en la reacción, como se muestra en la ecuación 3.3.

$$Rapidez_f = k_f[A]^a[B]^b \quad (3.3.)$$

Donde $Rapidez_f$ representa la rapidez de reacción hacia adelante (llamando así a la formación de productos) y k_f es la constante de rapidez, la cual está directamente relacionada con los parámetros de temperatura y la presencia de los catalizadores, representando $[A]$ y $[B]$ las concentraciones molares de A y B .

Y en el caso de la reacción inversa (ver expresión 3.4.):

$$Rapidez_b = k_b[C]^c[D]^d \quad (3.4.)$$

Por lo tanto evaluando la rapidez en sentido progresivo y opuesto, resulta igual a:

$$k_f[A]^a[B]^b = k_b[C]^c[D]^d \quad (3.5.)$$

Haciendo un reordenamiento de la ecuación, se obtiene K , o la constante molar de equilibrio, válida para soluciones diluidas y se expresa de la siguiente manera (Appelo & Postma, 2010).

$$\frac{[C]^c[D]^d}{[A]^a[B]^b} = \frac{k_f}{k_b} = K \quad (3.6.)$$

La expresión antes obtenida, indica que aunque el método de derivación no tiene validez oficial, la constante de equilibrio obtenida, demuestra que sólo depende de la estequiometría de la reacción química, haciendo que la suma de los exponentes en la constante de rapidez determine el orden de la reacción (Gary, 2009).

Aunque en las reacciones llevadas a cabo, los reactivos no se consumen en su totalidad para alcanzar a formar los productos deseados, si se analizan los productos que se han formado y la cantidad de reactivos consumidos, se concluye que la concentración de ambos permanece constante (Gary, 2009).

Es por ello, que pueden escribirse constantes de equilibrio para una cantidad importante de procesos químicos, entre ellos los mostrados en la tabla 3.4, de los cuales, algunos como ácido/base y solubilidad que pertenecen a la disociación, la formación de productos o llamada también de complejos, el determinado por las reacciones (redox) y una distribución o reparto entre dos fases (agua y disolvente no acuoso) (Gary, 2009).

Tabla 3.4. Constantes de equilibrio en diferentes procesos químicos.

<i>Equilibrio</i>	<i>Reacción</i>	<i>Constante de equilibrio</i>
<i>Disociación ácido-base</i>	$HA + H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + A^-$	K_a , constante de acidez
<i>Solubilidad</i>	$MA \leftrightarrow M^{n+} + A^{n-}$	K_{sp} , producto de solubilidad
<i>Formación de complejos</i>	$M^{n+} + aL^{b-} \leftrightarrow ML_a^{(n-ab)+}$	K_f , constante de formación
<i>Reducción-oxidación</i>	$A_{red} + B_{ox} \leftrightarrow A_{ox} + B_{red}$	K_{eq} , constante de equilibrio de reacción
<i>Distribución de fase</i>	$A_{H_2O} \leftrightarrow A_{orgánico}$	K_D , coeficiente de reparto

Fuente: (Gary, 2009)

Efectos de la temperatura en las constantes de equilibrio.

La influencia de la temperatura, además de estar en relación con el equilibrio, también modifica el valor de su constante. Esto se da a partir de que si llegado al punto de equilibrio se aumenta la temperatura, el sistema que sigue el principio de Le Chatelier, que dice, que: “Si un sistema en equilibrio se modifica alguno de los factores que influyen en el mismo (temperatura, presión o concentración), el sistema evoluciona de forma que se desplaza en el sentido que tienda a contrarrestar dicha variación.”, por lo que dicho sistema se opone a ese aumento de energía calorífica desplazándose en el sentido que absorba calor, es decir, hacia el sentido que marca la reacción endotérmica (Gary, 2009).

Generalmente en las aguas naturales, no es posible encontrar condiciones estándar de temperatura a 25°C y presión de 1 atm, por esto, con referencia al párrafo anterior, las variaciones de la constante, son usualmente calculadas con la ecuación de Van't Hoff, como se muestra a continuación en la ecuación 3.7. (Appelo & Postma, 2010; Fagundo & González, 2012).

$$\frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H_r}{RT^2} \quad (3.7.)$$

Donde:

- ΔH_r es la reacción de la entalpía.
- R la constante de los gases ideales.
- y T la temperatura.

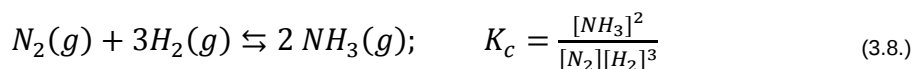
La temperatura, también es importante, debido a que el aumento de esta, conlleva que se aumente también la rapidez con la que se tiende al equilibrio, elevando el número y la energía de las colisiones entre las especies reaccionantes, por lo que la rapidez de muchas reacciones endotérmicas aumenta alrededor de dos a tres veces por cada 10 °C de elevación de la temperatura (Gary, 2009).

Efectos de la presión sobre los equilibrios.

Debido a que la mayor parte de las reacciones en el medio acuoso ocurren en solución, los cambios normales de presión tienen poco efecto en el equilibrio químico porque los líquidos no se pueden comprimir como los gases (Gary, 2009).

Efecto de las concentraciones en el equilibrio.

La variación de las concentraciones en cualquiera de las especies que conforman el equilibrio, no interfiere con el valor de la constante de equilibrio, aunque el valor de las concentraciones de las restantes especies en el equilibrio, sí se modifica, tal y como se demuestra en la expresión 3.8. (Gary, 2009).



Lo que indica una disminución del NH_3 , retirándolo a medida que se va obteniendo, hará que el equilibrio se desplace hacia la derecha y se produzca más NH_3 , con el fin de que K_c siga permaneciendo constante (Gary, 2009).

III.V. Cinética de disolución de los minerales.

El equilibrio como se ha visto en párrafos anteriores, se alcanza cuando las concentraciones de los iones en la disolución llegan a permanecer constantes, todo este proceso depende el tiempo principalmente, y de factores que determinan la cinética química de un mineral como lo son: (Reyes , 2017).

- El tamaño de grano del mineral.
- La magnitud de la turbulencia del fluido en contacto con el mineral.
- La temperatura.
- Y, la lejanía de equilibrio, o el potencial de transferencia de masa.

La cinética es la descripción de las velocidades de reacción, donde el orden de una cada una de éstas, define las velocidades del proceso y las concentraciones de las especies reaccionantes, gobernado por la cantidad de especies que deben colisionar para que la reacción tenga lugar (Gary, 2009).

Las reacciones de primer orden indican, los procesos cuya rapidez es proporcional a la concentración de una sola sustancia, y considera la reacción: (Gary, 2009).



La sustancia A podría ser un compuesto que se descompone para formar uno o más productos. La rapidez de la reacción es igual a la rapidez de la desaparición de A , y es proporcional a la concentración de A , así la concentración de ambos se puede modelar como función el tiempo, siendo así el cambio de concentración de A o P con el tiempo (Reyes, 2017; Gary, 2009).

$$-\frac{dA}{dt} = k[A] \quad (3.10.)$$

De acuerdo a la ecuación 3.10. que incluye el signo menos frente del término del lado izquierdo, para indicar que A desaparece en función del tiempo y la constante k se le llama constante específica de rapidez a la temperatura especificada, y sus dimensiones son recíproco del tiempo, por ejemplo s^{-1} , esta ecuación está representada de forma diferencial, debido a que en esta ecuación el orden de reacción es igual a la suma de los exponentes a los que están elevados los términos de concentración en su ecuación de rapidez (Gary, 2009).

Y la forma integrada de esta ecuación, pasará a ser la siguiente:

$$\log[A] = \log[A]_0 - \frac{kt}{2.303} \quad (3.11.)$$

En la que $[A]_0$ es la concentración inicial de A ($t = 0$), y $[A]$ es su concentración cuando el tiempo es t , medido desde que se inicia la reacción. Esta ecuación, define la cantidad de A que ha reaccionado después de un determinado intervalo de tiempo, así el tiempo en que se completa la reacción es independiente de la concentración para las reacciones de primer orden (Gary, 2009).

III.VI. Mecanismos de disolución.

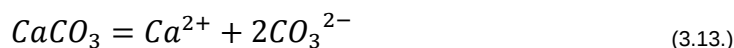
Disolución de minerales solubles.

Cuando todos los productos de una reacción de disolución son especies iónicas, se dice que la solución es congruente, tal es el caso de la disolución a causa de la interacción con el agua de los minerales: halita, calcita, dolomita y yeso, de los cuales a continuación se muestran sus reacciones y ecuaciones de equilibrio (Fagundo & González, 2012).

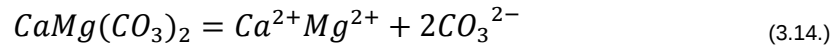
Halita



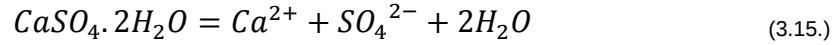
Calcita



Dolomita



Yeso



Relacionado con el paisaje kárstico, la alta solubilidad de las rocas salinas, los depósitos de estos minerales son rápidamente destruidos por la acción disolvente de las aguas meteóricas, llegando a formar cavernas de grandes magnitudes, sobre todo en formaciones con alto contenido de yeso. De la misma manera, las formaciones calizas y dolomías constituyen afloramientos más comunes de las rocas kársticas.

Disolución de gases.

El proceso de disolución de gases en el medio acuoso, que se encuentran presentes en la atmósfera, depende de la naturaleza del gas, de la presión del gas en equilibrio con el agua y de la temperatura, respondiendo a la Ley de Henry (Fagundo & González, 2016).

La disolución de gases como el oxígeno y el bióxido de carbono, es importante ya que estos dos gases, son necesarios para la vida y desarrollo en los sistemas acuáticos (Milán, 2015).

Oxígeno disuelto O_2 .

La determinación del oxígeno disuelto, del cual sus valores de saturación ante las variables antes mencionadas, se establecen en 13.3 ppm a una temperatura de 10°C y 7.6 ppm a 30°C, este indicador, es un parámetro importante de las condiciones bioquímicas del agua en el sitio, y tiene la capacidad de oxidación de diferentes tipos de constituyentes que se encuentran en forma reducida, modificando consecuentemente la solubilidad de estos (I.G.M.E., 1985).

Este gas, proviene principalmente de dos fuentes:

- La producción fotosintética de las algas que pueden producir oxígeno en volúmenes pequeños, aunque cuando éstas mueren consumen más oxígeno del que aportan.
- Y uno de mayor significancia como es el que se da por contacto con el aire, fuente del reoxigenamiento (Milán, 2015).

Los procesos de oxidación de materia orgánica pueden consumir oxígeno en la parte superior de la zona no saturada, así también su contenido en aguas subterráneas profundas puede ser notable. Cuando un agua superficial carece de oxígeno indica una saturación de nutrientes que ha consumido todo el oxígeno, dándole al agua apariencia y olor desagradables (Fagundo & González, 2016).

En la limnología que quiere decir: “estudio de los lagos”, un nivel demasiado alto o bajo, indica una posible afectación a la vida acuática, ya que el oxígeno no

compuesto, y el proceso de disolución del mismo puede concebirse de manera similar al de la sal o azúcar cuando el agua es agitada y al ser dependiente de la luz solar, este gas disuelto, alcanzará su máximo de producción en el día y disminuirá por las noches (Fondriest Environmental, Inc., 2017).

Relacionado a la oxigenación del agua, se encuentra el potencial redox o E_h de un tipo de agua en particular, que mide el estado de óxido-reducción de ésta y la contribución de especies electroactivas presentes, que al compararse con el O_2 puede encontrarse un comportamiento similar, debido a que las aguas bien oxigenadas contienen E_h positivos o ligeramente negativos, mientras que en aguas mal oxigenadas, se presentan E_h en forma netamente negativa (Marín, 2005).

Bióxido de carbono CO_2

Este gas disuelto en agua procede de la zona donde se lleva a cabo la respiración de los organismos y la descomposición de la materia orgánica, siendo factor para la disolución de calizas, aunque si la velocidad del flujo es pequeña, da lugar a la hidrólisis de silicatos, otro de los mecanismos que da lugar a la formación de estos iones (Milán, 2015).

La absorción de este gas, se da fácilmente en el agua, ya que es aproximadamente 200 veces más soluble que el oxígeno, el también llamado anhídrido carbónico, juega un papel muy importante en la química del agua, disolviéndose siempre en función de su presión parcial (pCO_2), y cuando se encuentra en este proceso, pasa de la fase gaseosa ($CO_{2(g)}$) a acuosa ($CO_{2(aq)}$), y una parte de este se asocia con moléculas de agua para formar ácido carbónico (H_2CO_3), presentado en las siguientes reacciones (Appelo & Postma, 2010).



y consecuentemente:



La presencia por naturaleza en el medio acuoso, difiere de acuerdo con la forma en que se mueve el agua y la zona hidrogeológica que ocupa, por ejemplo: en la zona donde se presenta aireación, el gas es relativamente más elevado, ya que en este espacio se da lugar a intensos procesos de descomposición bacteriana (Fagundo & González, 2016). Y junto con parámetros como: temperatura y el tiempo de reacción, este gas determina el comportamiento de la disolución de los minerales, principalmente los carbonatos, en condiciones naturales a lo largo de un tiempo, el contenido de $CO_{2(g)}$ y $CO_{2(aq)}$, es el resultado de la acción del tiempo, así como de las condiciones geológicas del sitio en estudio (Milán, 2015).

La importancia de este gas, da paso al estudio de uno de los aspectos más estudiados de la química, llamado “*equilibrio carbónico*” por ser un gas que además de poderse disolver en el agua, actúa como cualquier ácido inorgánico y

da al agua la denominación de “agresiva”, cuando se disuelve $CaCO_3$ y de “incrustante” si se deposita carbonato desde el bicarbonato soluble y reduce su valor del pH, mientras que este último en las aguas agresivas, incrementa su valor (Marín, 2005).

En el caso de los suelos, este tipo de gas, es generado por la respiración de los seres vivos y la descomposición de material orgánico, como se demuestra en la reacción 3.18. (Appelo & Postma, 2010).



III.VII. Reacciones de óxido-reducción.

Estas reacciones tienen como particularidad que al llevarse a cabo, los elementos químicos pasan de un compuesto a otro perdiendo o ganando electrones modificando así su valencia, y éste proceso ocurre cuando el agua está siendo infiltrada en un medio no saturado, jugando un papel muy importante la cantidad de bacterias y otros microorganismos presentes en él (González de Vallejo et al., 2002).

Este mecanismo es de importancia en la identificación de contaminantes de tipo orgánico y nitrogenado que provocan al agua mal olor y presencia de color, ya que al oxidarse producen CO_2 y NO_3^- , respectivamente. Aunque con la ausencia de oxígeno o la escasez de este gas, se pueden producir procesos anaerobios en lo que se forman CH_4 , SH_2 , S , Fe^{2+} , Mn^{2+} , NH_4^+ , N_2 , y NO_2^- , por la reducción de NO_3^- , SO_4^{2-} , y compuestos de hierro y manganeso existentes en el suelo (González de Vallejo et al., 2002).

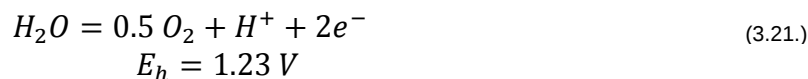
Para llevar a cabo el proceso, se deben de tener dos moléculas, una oxidante y otra reductora, para que se pueda producir el intercambio de electrones y la fortaleza de éste par redox, se puede calcular a través de la siguiente expresión llamada: ecuación de Nerst.

$$E_h = E_h^0 + \frac{RT}{nF} \ln \frac{(Oxidante)}{(Reductor)} \quad (3.19.)$$

Donde E_h , medido en voltios o milivoltios, es el potencial de oxidación-reducción o potencial redox; E_h^0 , es una constante que depende de la naturaleza del oxidante y del reductor y se refiere a las condiciones estándares; F es la constante de Faraday y n es el número de electrones intercambiados. Si se expresa el logaritmo en forma decimal, se obtiene:

$$E_h = E_h^0 + 0,23 \log \frac{(Oxidante)}{(Reductor)} \quad (3.20.)$$

Debido a que el agente oxidante por naturaleza, es el oxígeno, el límite superior del potencial redox, se presenta por características contenidas en la siguiente reacción (P. Higuera & R. Oyarzun, 2017).



A la fecha, se han proporcionado herramientas que de manera gráfica pueden dar a conocer la secuencia de reacciones redox predominantes, cuando en un agua se tiene un $pH = 7$, tal como puede observarse en la figura 3.1., un ejemplo notable de las reacciones redox es que la reducción de sulfatos o sulfato-reducción puede estar contaminada con la oxidación de materia orgánica, pero no con la oxidación de Fe^{2+} (Appelo & Postma, 2010).

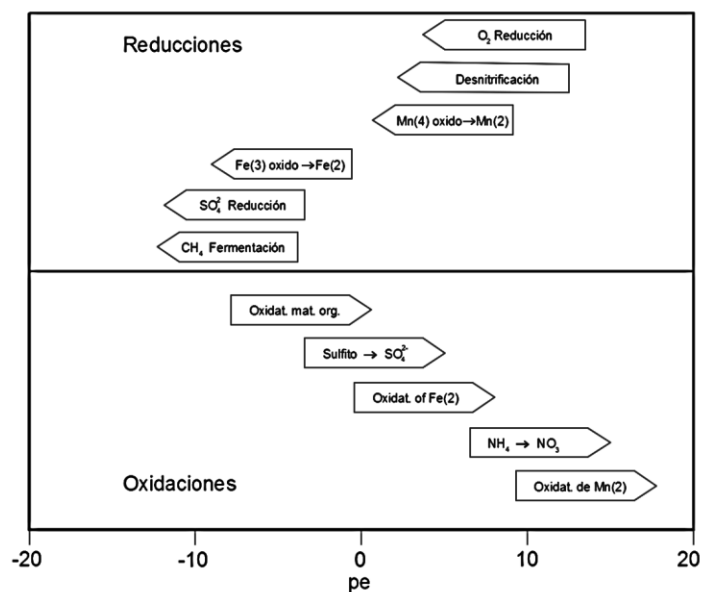


Figura 3.1. Secuencias de las principales reacciones redox con valor de $pH=7$ en un sistema natural.

Fuente: (Appelo & Postma, 2010).

El conocer los niveles de este parámetro, puede facilitar la determinación del destino de contaminantes como: los nitratos producto de actividad agrícola, el vertido de lixiviados, derrames de contaminantes industriales o el drenaje de minas con contenido de metales pesados, ya que la forma en que se intercambian los átomos al llevarse a cabo estas reacciones, puede ser predicha por medio del equilibrio termodinámico estándar (Appelo & Postma, 2010).

A continuación en la tabla 3.5, se muestran rangos de valores de potencial redox para reacciones en condiciones de temperatura a $25^\circ C$ y 1 atm de presión.

Tabla 3.5. Valores de potencial redox en reacciones a condiciones optimas.

Reacción	E° , Volt
$\text{Fe(s)} \leftrightarrow \text{Fe}^{2+} + 2\text{e}^-$	-0.44
$\text{Cr}^{2+} \leftrightarrow \text{Cr}^{3+} + \text{e}^-$	-0.41
$\text{H}_2 \leftrightarrow 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	0
$\text{Cu}^+ \leftrightarrow \text{Cu}^{2+} + \text{e}^-$	0.16
$\text{S}^{2-} + 4\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{SO}_4^{2-} + 8\text{H}^+ + 8\text{e}^-$	0.16
$\text{As(s)} + 3\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{AsO}_{3(\text{aq})} + 3\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	0.25
$\text{Cu(s)} \leftrightarrow \text{Cu}^+ + \text{e}^-$	0.52
$\text{H}_3\text{AsO}_{3(\text{aq})} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{AsO}_{4(\text{aq})} + 2\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	0.56
$\text{Fe}^{2+} \leftrightarrow \text{Fe}^{3+} + \text{e}^-$	0.77
$\text{Fe}^{2+} + 3\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{Fe(OH)}_3 + 3\text{H}^+ + \text{e}^-$	0.98
$2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{O}_{2(\text{g})} + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$	1.23
$\text{Mn}^{2+} + 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{MnO}_2 + 4\text{H}^+ + 2\text{e}^-$	1.23

Fuente: (Appelo & Postma, 2010).

III.VII. Diagramas Eh-pH.

Los cambios de acidez en el agua y/o cambios en su estado de oxidación, son la principal causa de muchos de los procesos químicos de gran interés que se llegan a presentar en el agua, muchas veces estos trabajan en conjunto y para poder apreciar el funcionamiento de ambas variables se utilizan los diagramas de Eh-pH o pe-pH como se muestra en la figura 3.2. Estos diagramas permiten de manera práctica, mostrar las reacciones de equilibrio entre fases sólidas y líquidas presentes en un determinado estado de oxidación-reducción con los valores de cada uno de sus ejes (Sánchez, 2012; Fagundo & González, 2012).

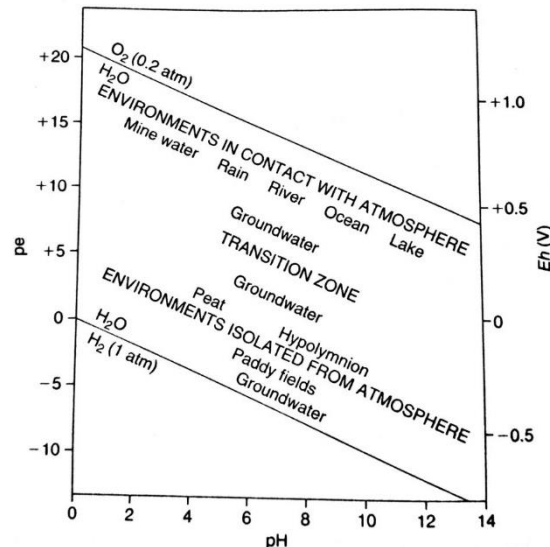


Figura 3.2. Tipos de agua en relación a las variantes de pe & pH en condiciones naturales.

Fuente: (Appelo & Postma, 2010).

Así como se observa en la figura 3.3., para los iones de Fe donde un agua tiene valores de $pH = 6$ y un $Eh = 0.1$, que al intersectarse queda marcado el punto **A**, de este modo indica que el Fe estaría en disolución como Fe^{2+} . Si el medio se hiciera más oxidante (flecha punteada vertical), más básico (flecha punteada horizontal), o ambas cosas a la vez (flecha inclinada), se pasaría al campo de Fe_2O_3 , es decir, que el hierro se precipitaría como mineral Hematites (Sánchez, 2012).

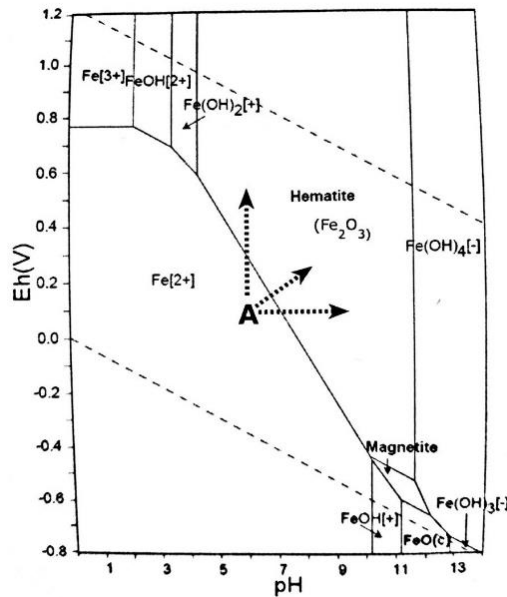


Figura 3.3. Relación Eh-pH para iones Fe^{++} y modos de equilibrio químico.
Fuente: (Sánchez, 2012).

En resumen, los límites verticales entre dos campos adyacentes representan reacciones que sólo se producen por cambios de pH (el Eh o pe no influye), de manera análoga, los límites horizontales reflejan equilibrios afectados solamente por cambios en el Eh (Sánchez, 2012).

Capítulo IV. Modelación hidrogeoquímica.

IV.I. Antecedentes.

- “Modelo químico para sistemas geológico”, es la interpretación más aceptada de lo que es un modelo hidrogeoquímico, el cual se dedica a hacer el cálculo de las propiedades químicas y los procesos, tales como la termodinámica, cinética o mecánica cuántica de un sistema, por lo que puede nombrarse también como: la aplicación de modelos numéricos, los cuales proporcionan información de manera detallada acerca del origen, la interacción agua-roca y los patrones de flujo de cada uno de los procesos en el medio acuoso (Zayago, 2015; Morán-Ramírez et al., 2013).

Basados en la intención de determinar, las reacciones que han ocurrido, condiciones bajo las cuales ocurrieron, que presencia han tenido y la predicción del cambio de la composición mineralógica y de la calidad del agua al estar expuesta a procesos naturales y a las perturbaciones del sistema (Fagundo & González, 2012).

Gracias a la constante línea de investigación, para 1970, comenzó a darse la difusión de los primeros programas para ordenador que permitieron realizar todas estas determinaciones de manera más sencilla, uno en especial es el código WATEQ (Truesdell y Jones, 1974). Y así su constante evolución dio paso a la creación de varios más, como: MINEQL (Westall et al., 1976), BALANCE (Parkhurst et al., 1982), PHREEQE (Parkhurst et al., 1980), MINTEQA2 (Folmer et al., 1984) NETPATH (Plummer et al., 1991) PHREEQC 2.0 (Parkhurst & Appelo, 1999), por mencionar algunos que han tenido gran difusión en lo que al tema respecta, aunque alrededor del mundo se han desarrollado otros con menor difusión (Martínez et al., 2000).

Esto ha sido posible, gracias a que los ordenadores, cada vez pueden resolver más y mejor los cálculos requeridos en los modelos de equilibrio y desde interfaces amigables con el modelador, siempre y cuando este último cuente con el conocimiento tanto metodológico como del sitio de estudio (Martínez et al., 2000).

Y de todo lo anterior, surge la modelación hidrogeoquímica, siendo definido tal concepto, como: Proceso por el cual los principios físico-químicos se aplican a la interpretación del origen y funcionamiento de los sistemas hidrogeoquímicos. Que aunque hoy en día los softwares de modelación facilitan este proceso, su realización puede llevarse a cabo de forma manual si se tiene el conocimiento adecuado de las condiciones de equilibrio (Martínez et al., 2000).

IV.I.1. Enfoque Termodinámico.

La raíz de cada proceso, se basa en el entendimiento de que cuando una solución acuosa circula en contacto con los minerales, la cantidad de cada mineral que el agua puede disolver, se determina mediante la relación termodinámica entre el producto de las concentraciones en la solución de los iones que forman cada mineral y el producto de las concentraciones de esos iones en el propio mineral (Martínez et al., 2000).

Así que cuando ambos productos de concentración iónica se igualan, el agua pasa a estar en equilibrio respecto al mineral en cuestión y sustancias relacionadas, este no se disuelve ni precipita, en esta situación se logra demostrar la siguiente ecuación:

$$K = [\text{anión en solución}][\text{catión en solución}]/[\text{fase sólida mineral}] \quad (4.1.)$$

donde K es la constante de equilibrio de la reacción de disolución del mineral i y los corchetes, indican que las concentraciones se expresan en actividades termodinámicas. Y como se ha establecido en el Capítulo III, el valor de K , para una reacción dada, puede calcularse a partir de la energía libre de formación o de Gibbs para cada mineral, ya que esta constante puede variar dependiendo de la temperatura (Martínez et al., 2000).

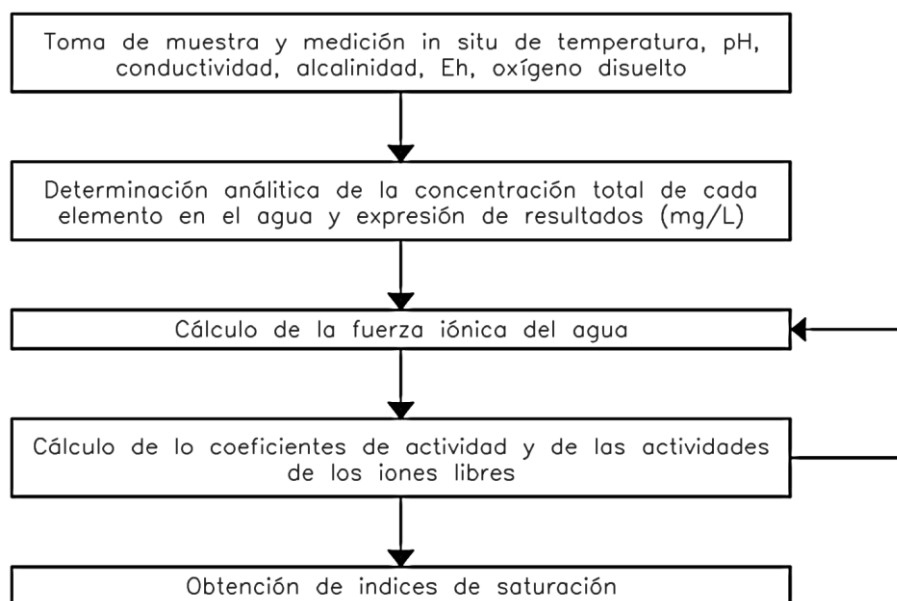
IV.I.2. Índice de Saturación (IS).

Es un valor de importancia, ya que es el primer acercamiento a la relación que existe entre las actividades en solución de los iones que forman un determinado mineral y la constante de equilibrio de la reacción de disolución de ese mineral, determinando ambos parámetros a la misma temperatura o sea la que se alcanza en el sitio de estudio (Martínez et al., 2000).

Y su interpretación se hace de la siguiente manera: si el IS es positivo, significa que la solución está sobresaturada y el mineral en cuestión, por ejemplo si se tratara de yeso, este tenderá a precipitar; si es negativo, indica entonces que la solución está subsaturada y, al entrar en contacto con yeso, procederá a disolverlo. Si el $IS = 0$, puede indicar que la solución está en equilibrio o saturada en yeso (Martínez, et al., 2000).

IV.I.3. Procedimiento de los cálculos del IS en el modelo.

Los cálculos numéricos, pueden ser realizados rápidamente por los códigos empleados en los programas para ordenador, pero esto se lleva a cabo mediante un procedimiento como el que se muestra en la figura 4.1.



*Figura 4.1. Esquema para el cálculo del IS.
Fuente: (Martínez, et al., 2000).*

IV.I.4. Alcance de aplicación del equilibrio químico.

Aunque el equilibrio químico, sea de utilidad para predecir si en determinadas condiciones, una reacción química estable se podrá producir o no, el sentido en el que se llevará a cabo y la magnitud en que se producirá tal desplazamiento, no permite conocer el tiempo que requerirán esos procesos y pasa a depender de la relación entre las velocidades de reacción y la velocidad de los sistemas de transporte, por lo que si el flujo en el caso de estudio es lento, la mayor parte de las reacciones hidrogeoquímicas se puede realizar de manera razonable, mientras que si se tienen elevadas velocidades de flujo, es probable que la mayor parte de las reacciones no alcancen el equilibrio, por lo que tendrá que decidirse que enfoque cinético que se ocupará para estudiarlas (Martínez et al., 2000).

IV.II. Tipos de modelos hidrogeoquímicos.

Los modelos pueden realizarse mediante dos aproximaciones diferentes, de los cuales se recomienda usar siempre en condiciones más adecuadas (Fagundo & González, 2012):

IV.II.1. Modelación directa:

Fue desarrollada con el objetivo de responder a cuestiones hipotéticas sobre las condiciones de reacción entre un líquido con determinadas características y una roca bajo condiciones experimentales restringidas por el modelador (Fagundo & González, 2012; Morán-Ramírez et al., 2013).

Da la posibilidad de poder hacer predicciones en la evolución de la composición del agua durante el transporte debida a un conjunto de reacciones químicas conocidas y dada un agua inicial de composición también conocida. (Martínez et al., 2000)

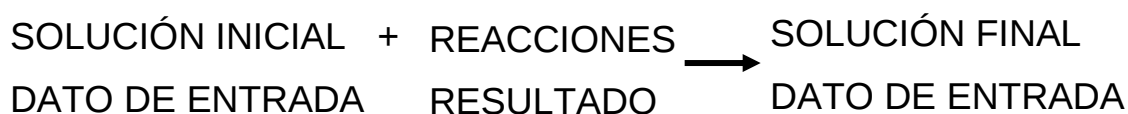


Este tipo de modelación, permite también la simulación de mezclas de aguas de diferente composición, logrando que al final del proceso pueda compararse con aguas de composición conocida y aunque pueden no coincidir en absoluto con ésta, ayude para comprobar el grado de conocimiento que se posee de los procesos físicos y químicos que realmente ocurren en el medio real (Martínez et al., 2000).

IV.II.2. Modelación inversa:

Infiere las reacciones que ocurrieron entre un agua y una roca después de reaccionar y que dieron origen a su composición mineralógica, su desarrollo está basado en una estrategia determinista para la interpretación de las composiciones químicas de los cuerpos de agua. Es de gran utilidad sobre todo si se cuenta con los datos necesarios para poder realizarse (Zayago, 2015; Fagundo & González, 2012).

El programa, calcula la cantidad neta de masa transferida entre las distintas fases del medio (líquida, sólida y gaseosa) para cada una de las reacciones especificadas.



Haciendo posible también, la simulación de mezcla de agua mediante la incorporación de dos soluciones iniciales y la indicación de que la proporción de mezcla, debe obtenerse sobre la base de un componente de carácter conservativo (Martínez et al., 2000).

Los programas que responden a este tipo de modelos pueden significar ventajas y limitaciones al proceder con el cálculo del balance de masas, por ejemplo, los programas BALANCE y NETPATH, pueden calcular la transferencia de masa entre las distintas fases del medio, pero no incluyen las propiedades termodinámicas, por lo que el usuario tiene que encargarse de comprobar que el

estado de saturación sea coherente con respecto a las disoluciones y precipitaciones calculadas, además de solicitar análisis bien equilibrados y libres de errores analíticos (Martínez et al., 2000).

Independientemente del software ocupado para realizar este proceso, siempre debe de considerarse al interpretar los resultados, las siguientes particularidades:

- Aunque en el medio real, muchas veces un mismo resultado puede ser producto de distintos conjuntos de reacciones, la modelación inversa no es de utilidad para conocer, cuál de los propuestos es el más probable;
- Este tipo de modelación, supone que el agua se halla en equilibrio con el medio, pero en realidad, todas las diferencias de las muestras tomadas sobre una misma línea de flujo, pueden corresponder a las variaciones temporales en la recarga del medio acuoso y no a reacciones con minerales.
- Al ser una evaluación entre dos puntos de un mismo flujo, no consideran la posibilidad de que una reacción invierta su sentido a lo largo del trayecto, lo que sucede con frecuencia en la realidad.

Es recomendable que en algunos casos se combinen ambos tipos de modelación, ya que ayuda a reducir la incertidumbre que genera el usar un solo tipo e incluso ayuda a ser un acercamiento de comprobación (Reyes, 2017).

Actualmente se han desarrollado modelos hidrogeoquímicos clasificados en cuatro grupos:

IV.II. Modelos de especiación y solubilidad.

Calculan las especies acuosas y determinan el estado de saturación de las soluciones, calculan la partición de un elemento entre las diferentes especies acuosas y complejos para determinar el estado de saturación en la solución, siempre que se cuente con el estudio completo del agua en estudio que por sus limitaciones, el agua necesita estar en condiciones de dilución < 0.7 molar y aunque no se puede modelar para condiciones de no equilibrio, ayuda a determinar si el agua está en condiciones de disolver o precipitar sólidos o gases (Fagundo & González, 2012).

Los programas de cómputo que manejan actualmente estos modelos son: WATEQ4F (Ball y Nordstrom, 1991), PHREEQC (Parkhurst y Appelo, 1999), MINTEA2 (Allison *et al.*, 1991), EQ3/6 (Wolery, 1992), EQBRM (Anderson y Crerar, 1993), SOLVEQ, CHILLER (Reed, 1982).

IV.III. Modelos de balance de masa.

Calculan reacciones a lo largo de un cauce, ayudados de datos químicos completos de todas las especies en solución, datos importantes mineralógicos y las posibles reacciones de transferencia de masa, pueden definir la masa neta de minerales o gases, tanto disueltos como precipitados a lo largo de una corriente. Aunque el modelo no dependa del equilibrio termodinámico, considera que el flujo se encuentra en estado estacionario y se requiere de un amplio conocimiento mineralógico a lo largo de la corriente, puede ayudar a determinar las reacciones químicas más importantes que controlan la evolución química del agua y conociendo las corrientes y las velocidades de estas últimas, puede calcular las velocidades de reacción (Fagundo & González, 2012).

Los programas de cómputo que están dedicados a este tipo de modelos, son: BALANCE (Parkhurst *et al.*, 1982), NETPATH (Plummer *et al.*, 1991), PHREEQC (Parkhurst y Appelo, 1999).

IV.IV. Modelos de transferencia de masa.

Similares a los procesos de especiación, pueden calcular la partición de un elemento entre las diferentes especies acuosas y complejos, pero también calcula los cambios causados por los procesos de transferencia de masa. Que aunque comparte limitaciones en cuanto a su proceso homólogo, este puede predecir todo el comportamiento geoquímico del sistema (Fagundo & González, 2012).

PHREEQ/PHREEQC, PHRQPITZ, SOLMINEQ, MINTEQA2, MINTEQ, MINEQL, EQ3/6, son de manera simultánea encargados de realizar modelos de especiación y solubilidad.

IV.V. Código de transporte de masa química.

Aunque manejan un modelo de flujo simple, en una sola dimensión o de carácter estacionario y su implementación puede llegar a presentar problemas numéricos significativos, son de utilidad para obtener un primer acercamiento de la evolución química del agua y las relaciones en modelos de masas acoplados con los flujos hidrodinámicos. (Fagundo & González, 2012)

Entre los principales softwares dedicados a este tipo de modelación se encuentran de manera libre o comercial PREEQM-2D, PHREEQC, CHMTRNS.

IV.VI. PHREEQC.

“Programa informático para realización de cálculos de especiación, reacciones discontinuas (batch), de transporte unidimensional, y geoquímicos inversos.”

“A Computer Program for Speciation, BatchReaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations.”

By:

David L. Parkhurst

C.A.J. Appelo

Derivado de las iniciales **pH-REdox-EQ**uilibrium, debido a que este software originalmente incluía funcionalidades basadas en el cálculo de equilibrios químicos en soluciones acuosas que dio inicio cerca del año 1975 y que con el tiempo adquirió más características las cuales se destacan en las diferentes versiones:

PHREEQ E: Este software escrito en lenguaje de programación Fortran, podía realizar operaciones básicas provenientes de la mezcla de aguas, la adición de reacciones irreversibles, la disolución y precipitación de fases minerales en la fase acuosa y soportando los efectos en el cambio de temperatura (Gidahatari, 2017).

PHREEQ C: Para 1995 el renovado software pero en lenguaje C, permitió modelar equilibrios como: el que existía en el intercambio iónico, los de complejización de superficies y los de gases a presiones pre-establecidas, además del transporte advectivo y el modelamiento geoquímico inverso (Gidahatari, 2017).

PHREEQ C-2: Con el desarrollo del tema se le siguieron agregando funcionalidades y en el año de 1999, el software conservando el lenguaje de programación de la versión anterior, podía evaluar reacciones cinéticamente controladas, modelar equilibrios sólido-solución, equilibrio de volumen fijo – fase gaseosa y se podía ya conocer la variación de sitios de intercambio en función de la concentración del reactante (Gidahatari, 2017).

Hasta ahora, la versión que prevalece es **PHREEQ C-3**, la cual ya incluye mejoras en el código de programación y contiene módulos adicionales que permiten la creación de gráficos que como herramienta brindan una mejor demostración de resultados, de la cual la interface gráfica de usuario es la encargada de construir los archivos y se basa en un documento de textos desarrollado por C.A.J. Appelo en lenguaje C (Gidahatari, 2017).

Este software en comparación y en diferencias principales con demás softwares de desarrollo libre y comercial, es su complejidad, que permite tener la capacidad necesaria para realizar cálculos de especiación e índice de saturación; cálculo de transporte discontinuo y unidimensional con reacciones reversibles e irreversibles, que incluyen equilibrios acuosos, minerales, gaseosos, sólidos en solución, complejos de superficie y de intercambio iónico, y transferencias molares en

reactivos específicos, reacciones cinéticamente controladas, mezcla de soluciones, y cambios de presión y temperatura; y el modelamiento inverso, el cual permite encontrar conjuntos de transferencias molares entre moles de gas y minerales y determinar las diferencias entre dos o más tipos de aguas manteniendo un grado de incertidumbre especificado en cada modelo (L. Parkhurst & Appelo, 2013).

Es de carácter libre y se encuentra disponible en la siguiente dirección web:

https://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/

Es recomendable descargar la versión ejecutable, según las condiciones del equipo de cómputo del usuario, así como la base de datos integrada, donde se encuentran almacenados los parámetros, las soluciones y las fases que se utilizaran para realizar el modelado, siendo tales conceptos, bloques de datos clave utilizados para definir un nombre, una reacción química, un logaritmo de K , la dependencia de dicho logaritmo con base en la temperatura, para cada uno de los componentes.

En esta página, también se pueden encontrar los manuales para cada una de las versiones, interfaces para la representación de los procesos hidrogeoquímicos por medio de gráficos y ejemplos de aplicación como el que se muestra en el siguiente capítulo. Además de tener ligas web que permiten tener accesos a las últimas publicaciones de revistas internacionales, relacionadas tanto al uso del software como al tema de estudio, en este caso la hidrogeoquímica.

PHREEQC Version 3-A es un programa que puede ser aplicado a varios procesos hidrogeoquímicos, por lo que tiene que considerarse, que, debido a la complejidad en que se ha desarrollado hasta el momento cuenta con limitantes importantes que se deben de tomar en cuenta, aunque la experiencia y conocimiento profundo del sitio de estudio o los análisis realizados pueden ser el mejor apoyo para poder proporcionar siempre mejores resultados (L. Parkhurst & Appelo, 2013).

Por ejemplo, en el caso de la modelación inversa, la inclusión de un límite de incertidumbre como se determina en el modelado se ha considerado como un avance en comparación con programas anteriores y de cierta similitud, sin embargo, el método numérico ha mostrado algunas inconsistencias en los resultados debido a que el calculador debe manejar números muy pequeños, por lo que el programa da como opción el poder cambiar la tolerancia utilizada por el calculador, aunque si crece el número de incertidumbre, puede alterar el cálculo, arrojando opciones de resultados que pueden llegar a no ser compatibles o solucionar la ecuación de equilibrio (L. Parkhurst & Appelo, 2013).

Capítulo V. Modelación hidrogeoquímica inversa en PHREEQC Version 3--A.

Los modelos inversos, resultan de mayor utilidad cuando el conocimiento del medio reactivo es mayor y se tiene como objetivo el explicar los cambios de composición observados sobre una línea de flujo, aunque los programas de modelación inversa, no proporcionan soluciones únicas, si se tiene un alto conocimiento del sitio de estudio, el modelador puede interpretar una correcta formulación del modelo conceptual (Morán-Ramírez et al., 2013).

Este capítulo se dedicará a ejemplificar la creación de un modelo hidrogeoquímico inverso, en el software PHREEQC Versión 3-A. El ejemplo a continuación, fue tomado del manual, “Description of Input and Examples for PHREEQC Version 3--A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations” (L. Parkhurst & Appelo, 2013).

En este ejemplo se representan dos composiciones de agua (ver tabla 5.1.), una de escorrentía efímera, que probablemente se haya desarrollado menos químicamente y una segunda de escorrentía perenne, la cual pudiera haber estado en contacto con el suelo por un tiempo más prolongado y haya tenido lugar un mejor desarrollo químico. Por lo que dicha diferencia de las reacciones llevadas a cabo para estas dos muestras puede encontrarse mediante la modelación inversa, infiriendo los grupos de minerales y gases que pudieron reaccionar en el medio acuoso. Y determinando las diferencias de composición entre las dos soluciones.

Tabla 5.1. Análisis químico de las muestras de agua (mmol/L).

Escorrentía	pH	SiO ₂	Ca ²⁺	Mg ²⁺	Na ⁺	K ⁺	HCO ₃ ⁻	SO ₄ ²⁻	Cl ⁻
Escorrentía efímera	6.2	0.273	0.078	0.029	0.134	0.028	0.328	0.01	0.014
Escorrentía perenne	6.8	0.41	0.26	0.071	0.259	0.04	0.895	0.025	0.03

Fuente: (L. Parkhurst & Appelo, 2013).

V.I. Parámetros a considerar.

La entrada de datos en PHREEQC Version 3--A así como su desarrollo es totalmente de carácter libre y está basado en símbolos químicos que permiten definir las especies acuosas y el intercambio de especies, el que se encuentre programado en lenguaje C, permite que cada dato sea asignado de manera dinámica en la memoria del ordenador, lo que impide que existan limitaciones en cuanto al tamaño de la matriz, longitudes de cadenas o números de entidades, como pueden ser: soluciones, fases, conjuntos de fases, intercambiadores,

soluciones sólidas, o superficies que se permiten sean introducidas al programa (Appelo & Postma, 2005; L. Parkhurst & Appelo, 2013).

El uso de una interface gráfica de usuario permite que los datos puedan tener una estructura libre, facilita el uso de KEYWORDS alojadas de manera independiente en bloques de datos y hace que la sintaxis en la generación de archivos tanto de entrada como de salida y sea tan sencilla que pueda hacerse desde un editor de texto estándar. Lo anterior también facilita la interpretación de los resultados. (Appelo & Postma, 2005; L. Parkhurst & Appelo, 2013).

V.II. Introducción de datos.

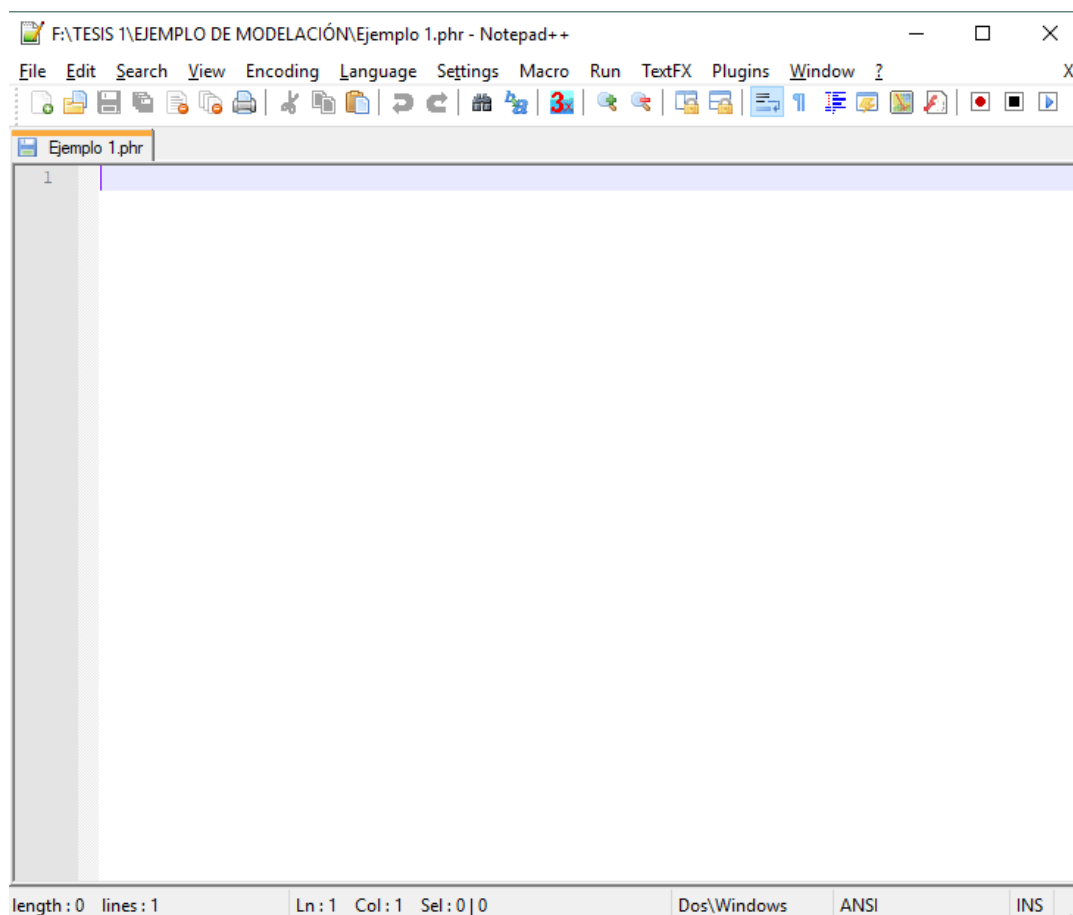
Así como existen archivos con bases de datos, el trabajo del modelador se basa en la creación de un archivo de entrada de extensión .phr, el cual utiliza KEYWORDS y datos para los distintos parámetros requeridos en la ejecución de operaciones que al ser realizadas arroja un archivo de salida de extensión .phr.out el cual incluye datos que deben ser interpretados por el modelador.

En la estructura de entrada, hace uso de las KEYWORDS, las cuales son palabras propias del lenguaje de PHREEQC que indican los cálculos que se están solicitando, la versión actual del programa dispone de 48 KEYWORDS clasificados en 4 grupos:

- Básicos: Permiten definir acciones para el archivo de entrada y consta de 16 comandos, entre estos se encuentran algunos como: Copy, Database, Delete, End, Print, Save, etc. cuidando siempre su uso y procurando que no se interfiera uno con otro.
- Para definición de datos: Como datos de especies en fase acuosa, especies intercambiables, especies de superficies y especies de isótopos.
- Para operaciones fundamentales: De especiación, intercambio iónico, complejización de superficies y mezcla de soluciones
- Para operaciones avanzadas: Cinéticas de reacciones, balance de isótopos, modelo de pitzer, modelo SIT, transporte, soluciones sólidas y LLNL model.

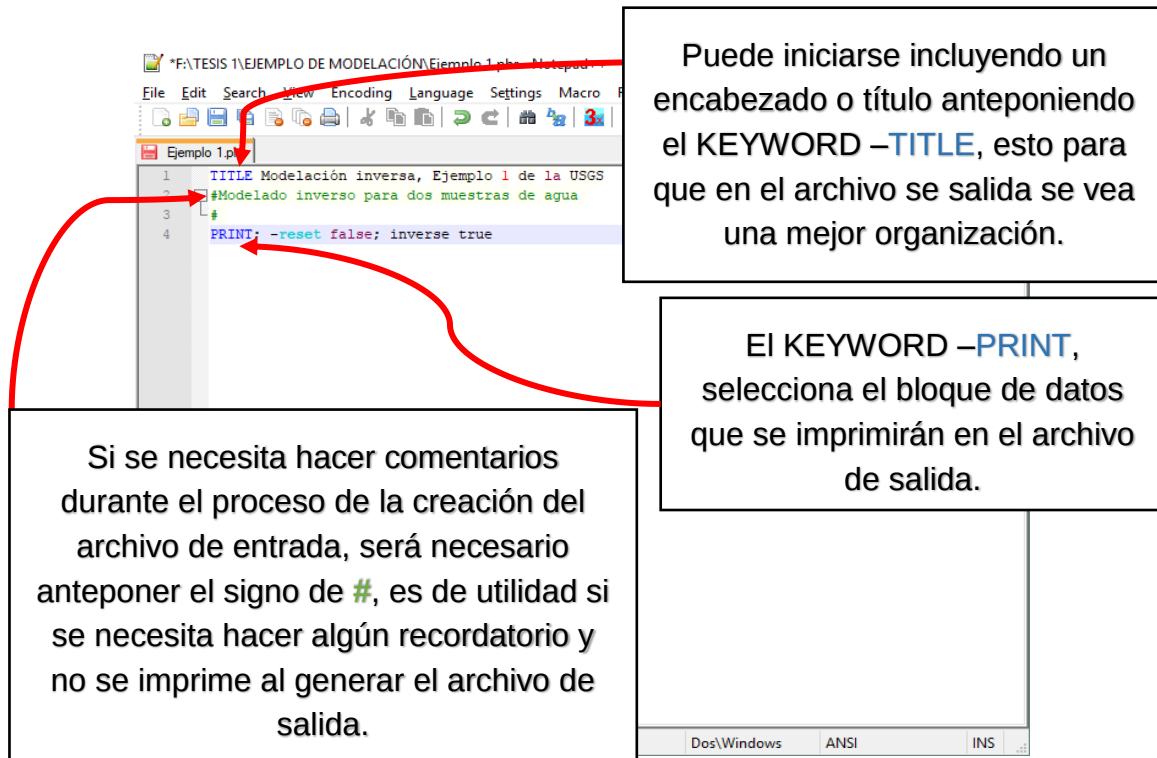
Aunque se trata de una herramienta con gran potencial para este caso en especial, sólo será necesario el uso del KEYWORD `-INVERSE_MODELING`, y otros que contienen las operaciones básicas como se describe a continuación:

En el primer paso se procede a la introducción de datos y cuerpo del archivo de entrada .phr, esto se hace abriendo la ventana ejecutable, y guardando el archivo en una carpeta donde se guardará de forma automática el archivo de salida y los gráficos emitidos por los resultados de la modelación ver figura 5.1.



*Figura 5.1. Ventana ejecutable del software.
Fuente: (Elaboración propia).*

En el segundo paso, se introducen los datos que conformaran el cuerpo del archivo de entrada tanto los comandos que definirán la salida de resultados y los parámetros de cada solución, en esta parte puede notarse que la introducción de cada palabra dependiendo de la jerarquía o el tipo de indicador que ocupa un color característico como se observa en la figura 5.2. y 5.3.



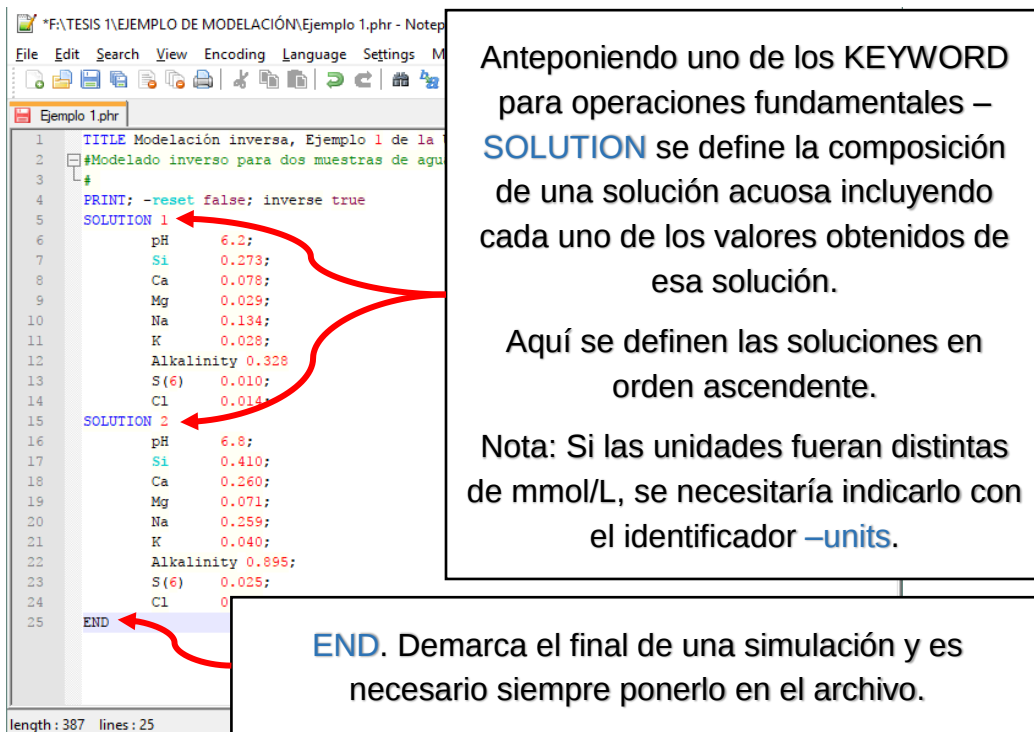
Puede iniciarse incluyendo un encabezado o título anteponiendo el KEYWORD **TITLE**, esto para que en el archivo de salida se vea una mejor organización.

Si se necesita hacer comentarios durante el proceso de la creación del archivo de entrada, será necesario anteponer el signo de **#**, es de utilidad si se necesita hacer algún recordatorio y no se imprime al generar el archivo de salida.

El KEYWORD **PRINT**, selecciona el bloque de datos que se imprimirán en el archivo de salida.

Figura 5.2. Introducción de los KEYWORDS para entrada de datos.

Fuente: (Elaboración propia).



Anteponiendo uno de los KEYWORD para operaciones fundamentales – **SOLUTION** se define la composición de una solución acuosa incluyendo cada uno de los valores obtenidos de esa solución.

Aquí se definen las soluciones en orden ascendente.

Nota: Si las unidades fueran distintas de mmol/L, se necesitaría indicarlo con el identificador **-units**.

END. Demarca el final de una simulación y es necesario siempre ponerlo en el archivo.

Figura 5.3. Definición de las soluciones a modelar.

Fuente: (Elaboración propia).

Hasta este punto, no se ha declarado que se trata de una modelación inversa, por lo que es en el tercer paso, donde serán declaradas las operaciones y procesos a realizar, las fases utilizadas, los balances y la incertidumbre que manejará el modelo matemático para poder calcular los datos de salida, lo anterior se demuestra en la figura 5.4. y 5.5.

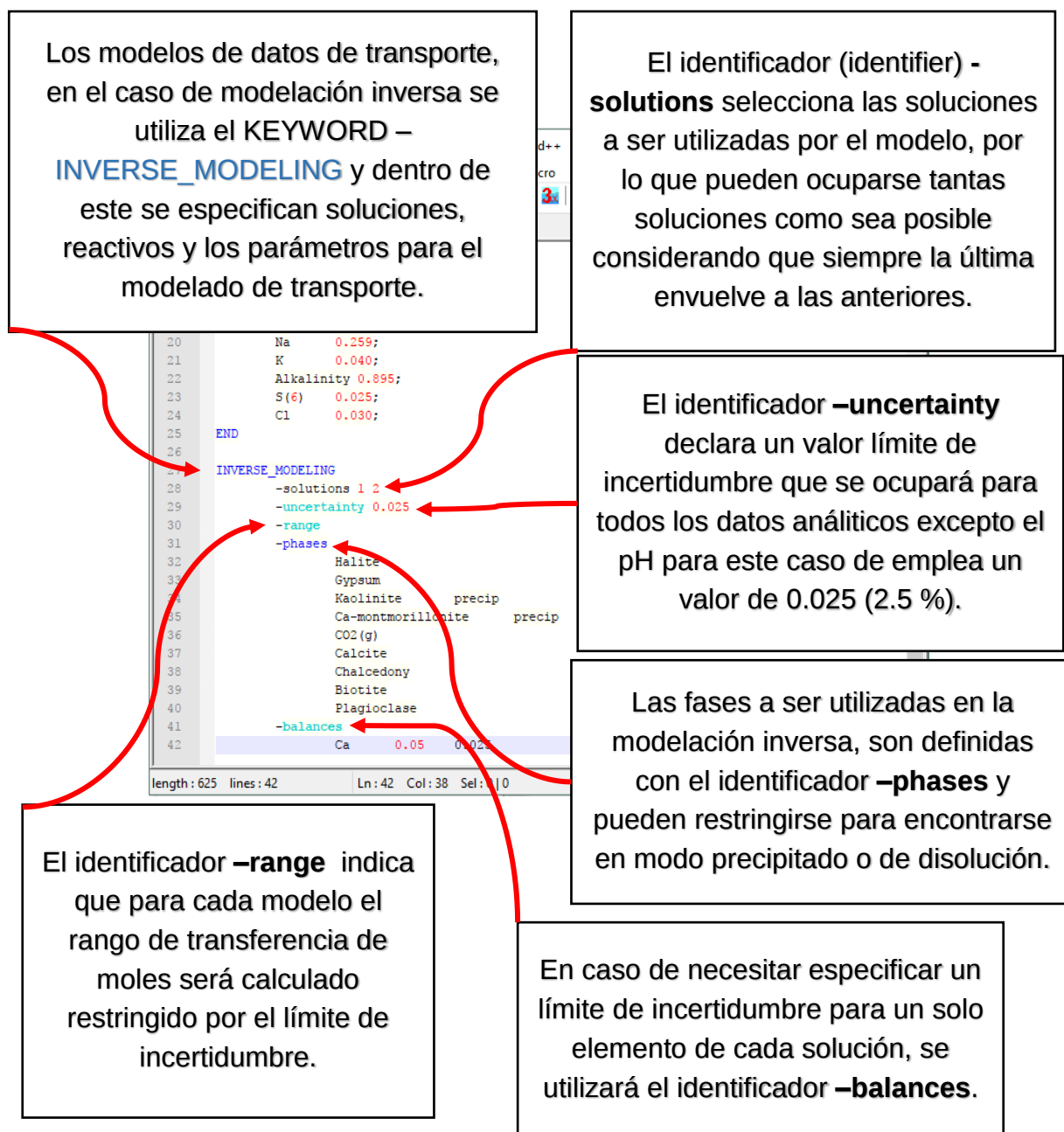
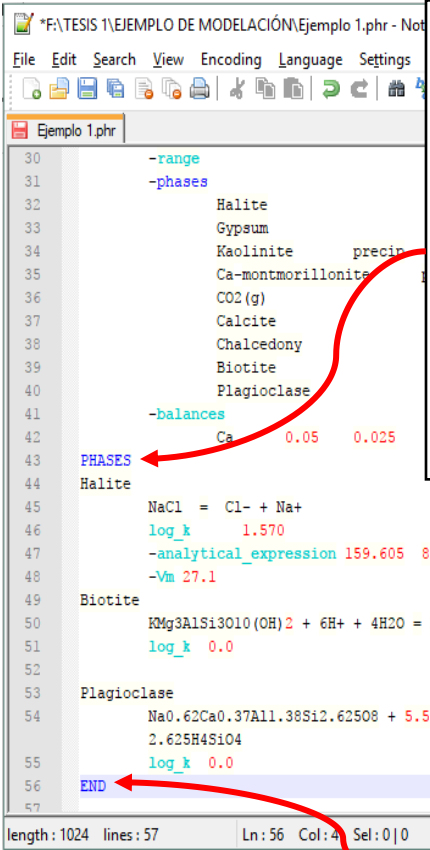


Figura 5.4. Utilización del KEYWORD –INVERSE MODELING para la declaración de la modelación inversa entre dos soluciones.

Fuente: (Elaboración propia).



PHASES, este KEYWORD es un bloque de datos claves utilizado para definir un nombre, una reacción química, un logaritmo de k, la dependencia de dicho logaritmo con base en la temperatura, para cada uno de los componentes cuando no se encuentra cargada una base de datos o se requiere hacer alguna modificación en un componente específico.

```

30 -range
31 -phases
32      Halite
33      Gypsum
34      Kaolinite
35      Ca-montmorillonite
36      CO2(g)
37      Calcite
38      Chalcidony
39      Biotite
40      Plagioclase
41
42 -balances
43      Ca 0.05 0.025
44
45 PHASES
46 Halite
47      NaCl = Cl- + Na+
48      log_k 1.570
49      -analytical_expression 159.605 8.4294e-2 -3975.6 -66.857 0 -4.9364e-5 # ref. 3
50      -Vm 27.1
51
52 Biotite
53      KMg3AlSi3O10(OH)2 + 6H+ + 4H2O = K+ + 3Mg+2 + Al(OH)4- + 3H4SiO4
54      log_k 0.0
55
56 Plagioclase
57      Na0.62Ca0.37Al1.38Si2.625O8 + 5.5 H+ + 2.5H2O = 0.62Na+ + 0.37Ca+2 + 1.38Al+3 +
58      2.625H4SiO4
59      log_k 0.0
60
61 END

```

END. Demarca de nuevo el final de una simulación y es necesario siempre ponerlo en el archivo.

Figura 5.5. Declaración de los compuestos minerales ocupados en la modelación.
Fuente: (Elaboración propia).

V.III. Almacenamiento y procesamiento de datos.

Una vez realizadas las actividades anteriores, se procede a la ejecución del archivo de entrada, para dicha actividad se puede utilizar la combinación de teclas de acceso rápido Ctrl+F6 o desde la barra de herramientas como se indica en la figura 5.6. y 5.7.

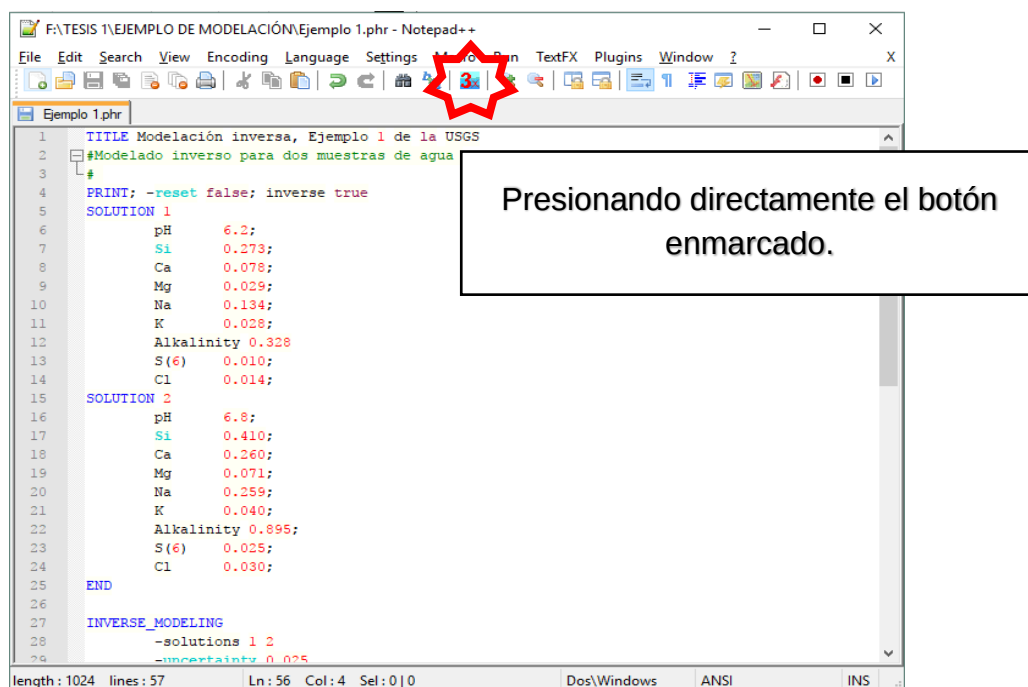


Figura 5.6. Ejecución del archivo de entrada desde el botón 3x.

Fuente: (Elaboración propia).

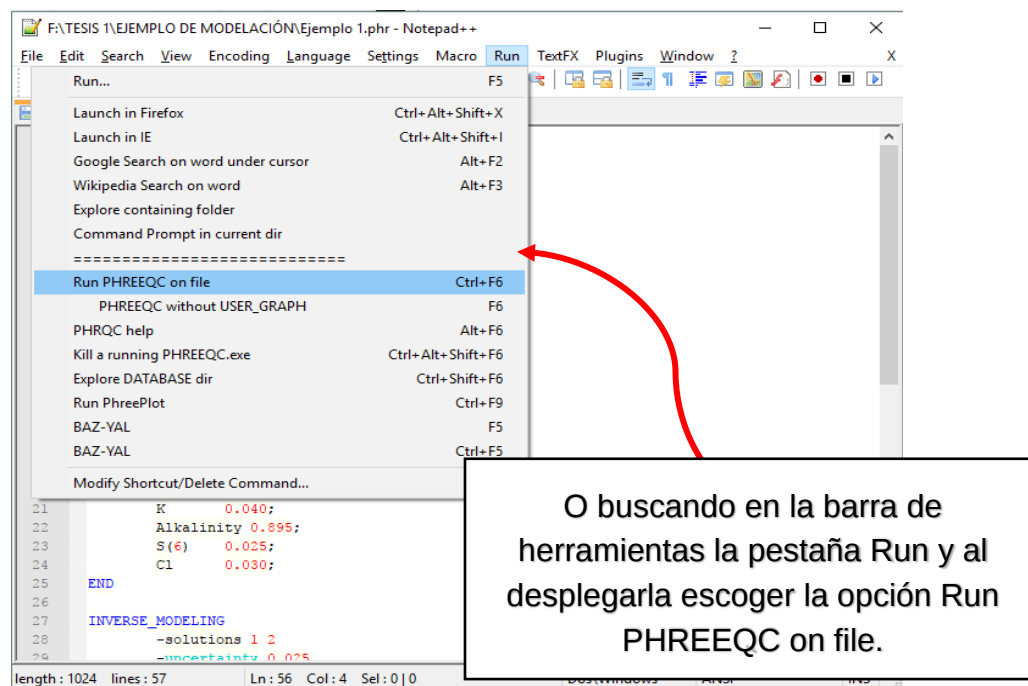


Figura 5.7. Ejecución del archivo de entrada desde la barra de tareas.

Fuente: (Elaboración propia).

En cada modelo inverso, las ecuaciones lineales son resueltas para el balance molar de cada uno de los elementos o estado de valencia, el balance de alcalinidad, el balance de electrones, el balance del agua dentro del sistema y el balance de cargas para cada solución. Las incógnitas encontradas en las ecuaciones corresponden a las transferencias de moles para las diferente fases y reacciones redox, los valores ajustados para cada elemento contenido en cada solución, incluyendo la alcalinidad y pH (L. Parkhurst & Appelo, 2013).

V.IV. Representación de resultados.

Los resultados para este modelado, se encuentran en un archivo de salida de extensión .phr.out, el cual se genera después de haber llevado a cabo la ejecución del archivo de entrada. Presentando ahora en pantalla un texto desarrollado como se observa en la figura 5.8.

```

23      TITLE Modelación inversa, Ejemplo 1 de la USGS
24      PRINT
25      reset false
26      Using C11 standard precision optimization routine.
27
28      Solution 1:
29
30      Input      Delta      Input+Delta
31      pH         6.200e+00 + 0.000e+00 = 6.200e+00
32      Al         0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
33      Alkalinity 3.280e-04 + 8.200e-06 = 3.362e-04
34      C(-4)      0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
35      C(4)       7.825e-04 + 0.000e+00 = 7.825e-04
36      Ca        7.800e-05 + -2.550e-06 = 7.545e-05
37      Cl        1.400e-05 + 0.000e+00 = 1.400e-05
38      H(0)      0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
39      K         2.800e-05 + -7.000e-07 = 2.730e-05
40      Mg        2.900e-05 + 0.000e+00 = 2.900e-05
41      Na        1.340e-04 + 0.000e+00 = 1.340e-04
42      O(0)      0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
43      S(-2)     0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
44      S(6)      1.000e-05 + 0.000e+00 = 1.000e-05
45      Si        2.730e-04 + 0.000e+00 = 2.730e-04
46
47      Solution 2:
48
49      Input      Delta      Input+Delta
50      pH         6.800e+00 + 0.000e+00 = 6.800e+00
51      Al         0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00

```

Figura 5.8. Representación del archivo de salida y resultados de concentración.
Fuente: (Elaboración propia).

Los resultados, son presentados en el modelo de salida por una lista de tres columnas que muestran las concentraciones en unidades de mol/kgw (moles sobre kilogramo de agua), a excepción del pH. Representando primero una columna que contiene los datos de entrada (Input), seguida de una columna donde se representa los valores adicionados por el límite de incertidumbre del modelo

(Delta) y encontrando en una última columna la suma de estos dos valores (Input+Delta), para cada uno de los elementos previamente considerados.

Después de este bloque de datos, se presentan las fracciones relativas (Solution fractions), si se modela considerando la evaporación, estos valores no siempre son iguales a la unidad y el que en este ejemplo se conserven con un valor de 1.0, se debe a que en la solución acuosa la disolución del yeso es demasiado pequeña. En el caso de ser un valor diferente, las siguientes dos columnas (Minimum y Maximum), representarán las variaciones de este parámetro.

Este grupo de valores, solo aparece si en el archivo de entrada se incluyó el identificador `-range` (ver figura 5.9.) (L. Parkhurst & Appelo, 2013).

```

59      Mg      7.100e-05 + -9.005e-07 = 7.010e-05
60      Na      2.590e-04 + 0.000e+00 = 2.590e-04
61      O(0)    0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
62      S(-2)   0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
63      S(6)    2.500e-05 + 0.000e+00 = 2.500e-05
64      Si      4.100e-04 + 0.000e+00 = 4.100e-04
65
66      Solution fractions:      Minimum      Maximum
67      Solution 1      1.000e+00      1.000e+00      1.000e+00
68      Solution 2      1.000e+00      1.000e+00      1.000e+00
69
70      Phase mole transfers:      Minimum      Maximum
71      Halite      1.600e-05      1.490e-05      1.710e-05      NaCl
72      Gypsum      1.500e-05      1.412e-05      1.587e-05      CaSO4.2H2O
73      Kaolinite   -3.315e-05      -5.517e-05      -1.139e-05      Al2Si2O5(OH)4
74      Ca-Montmorillon -8.155e-05      -1.107e-04      -5.213e-05      Ca0.165Al2.33Si13.67O10(OH)2
75      CO2(g)      2.987e-04      2.345e-04      3.634e-04      CO2
76      Calcite     1.180e-04      1.028e-04      1.326e-04      CaCO3
77      Biotite     1.370e-05      1.317e-05      1.370e-05      KMg3AlSi3O10(OH)2
78      Plagioclase 1.758e-04      1.582e-04      1.934e-04      Na0.62Ca0.37Al1.38Si2.625O8
79
80      Redox mole transfers:
81
82      Sum of residuals (epsilons in documentation):      4.823e+00
83      Sum of delta/uncertainty limit:      4.823e+00
84      Maximum fractional error in element concentration:      3.269e-02
85
86      Model contains minimum number of phases.

```

Figura 5.9. Fracciones relativas de cada solución.

Fuente: (Elaboración propia).

El bloque de datos que procede, es de los más importantes, ya que representa la lista de las transferencias molares (Phase mole transfers), en la primera columna, se contiene la optimización de las transferencias, demostrando con esto que el valor expresado, es la cantidad necesaria de tal compuesto para que adicionadas a la solución 1, puedan alcanzarse los valores de la solución 2. Si el valor de transferencia molar se encuentra en forma positiva, indicará una disolución; si está en negativo indica precipitación. La segunda y tercer columna son los valores

mínimos y máximos que pueden alcanzarse respetando el límite de incertidumbre, para este ejemplo dichos valores se representan en la figura 5.10. (L. Parkhurst & Appelo, 2013).

```

59      Mg      7.100e-05 + -9.005e-07 = 7.010e-05
60      Na      2.590e-04 + 0.000e+00 = 2.590e-04
61      O(0)    0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
62      S(-2)   0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
63      S(6)    2.500e-05 + 0.000e+00 = 2.500e-05
64      Si      4.100e-04 + 0.000e+00 = 4.100e-04
65
66  Solution fractions:
67  Solution 1      1.000e+00      1.000e+00      1.000e+00
68  Solution 2      1.000e+00      1.000e+00      1.000e+00
69
70  Phase mole transfers:
71  Halite      1.600e-05      1.490e-05      1.710e-05      NaCl
72  Gypsum      1.500e-05      1.412e-05      1.587e-05      CaSO4:2H2O
73  Kaolinite   -3.315e-05      -5.517e-05      -1.139e-05      Al2Si2O5(OH)4
74  Ca-Montmorillon -8.155e-05      -1.107e-04      -5.213e-05      Ca0.165Al2.33Si3.67O10(OH)2
75  CO2(g)      2.987e-04      2.345e-04      3.634e-04      CO2
76  Calcite     1.180e-04      1.028e-04      1.326e-04      CaCO3
77  Biotite     1.370e-05      1.317e-05      1.370e-05      KMg3AlSi3O10(OH)2
78  Plagioclase 1.758e-04      1.582e-04      1.934e-04      Na0.62Ca0.37Al1.38Si2.625O8
79
80  Redox mole transfers:
81
82  Sum of residuals (epsilons in documentation):      4.823e+00
83  Sum of delta/uncertainty limit:                    4.823e+00
84  Maximum fractional error in element concentration:  3.269e-02
85
86  Model contains minimum number of phases.
87
length: 7381 lines: 162 Ln: 30 Col: 21 Sel: 0|0 Dos\Windows ANSI INS
  
```

Figura 5.10. Valores de transferencia molar.

Fuente: (Elaboración propia).

Al no haberse calculado reacciones óxido-reducción, este bloque de datos (Redox mole transfer) se encuentra vacío. Después se representa el número de incertidumbre máximo con el cuál se llevaron a cabo los cálculos, si el número necesario para llevar a cabo los cálculos fuera mayor, que 0.05 como se estableció al principio en el archivo de entrada, el archivo de salida no se hubiera generado, por lo que el modelador, tendría que haber recurrido a la revisión del análisis químico para cada solución, revisar la correcta introducción de los parámetros, cerciorarse de ocupar la base de datos correcta o llegar a subir el grado de incertidumbre, aunque esto último podría llegar a ser necesario pero a la vez no es de ayuda para la determinación correcta de los parámetros, debido al número de soluciones que puede arrojar, tal como lo observado en la figura 5.11.

```

E:\TESIS 1\EJEMPLO DE MODELACIÓN\Ejemplo 1.phr.out - Notepad++
File Edit Search View Encoding Language Settings Macro Run TextFX Plugins Window ?
Ejemplo 1.phr Ejemplo 1.phr.out
59      Mg      7.100e-05 + -9.005e-07 = 7.010e-05
60      Na      2.590e-04 + 0.000e+00 = 2.590e-04
61      O(0)     0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
62      S(-2)    0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
63      S(6)     2.500e-05 + 0.000e+00 = 2.500e-05
64      Si      4.100e-04 + 0.000e+00 = 4.100e-04
65
66      Solution fractions:
67      Solution 1      1.000e+00      Minimum      Maximum
68      Solution 2      1.000e+00      1.000e+00      1.000e+00
69
70      Phase mole transfers:
71      Halite      1.600e-05      1.490e-05      1.710e-05      NaCl
72      Gypsum      1.500e-05      1.412e-05      1.587e-05      CaSO4:2H2O
73      Kaolinite   -3.315e-05      -5.517e-05      -1.139e-05      Al2Si2O5(OH) 4
74      Ca-Montmorillon -8.155e-05      -1.107e-04      -5.213e-05      Ca0.165Al2.335Si3.67010(OH) 2
75      CO2(g)      2.987e-04      2.345e-04      3.634e-04      CO2
76      Calcite     1.180e-04      1.028e-04      1.326e-04      CaCO3
77      Biotite     1.370e-05      1.317e-05      1.370e-05      KMg3AlSi3O10(OH) 2
78      Plagioclase 1.758e-04      1.582e-04      1.934e-04      Na0.62Ca0.37Al1.38Si2.625O8
79
80      Redox mole transfers:
81
82      Sum of residuals (epsilons in documentation):      4.823e+00
83      Sum of delta/uncertainty limit:      4.823e+00
84      Maximum fractional error in element concentration: 3.269e-02
85
86      Model contains minimum number of phases.
87
length: 7381 lines: 162 Ln: 30 Col: 21 Sel: 0|0 Dos\Windows ANSI INS

```

Figura 5.11. Reacciones Redox y límite de incertidumbre.

Fuente: (Elaboración propia).

Se recomienda no ocupar modelos con más de tres soluciones posibles, ya que pueden ser un factor de ruido al analizar el correcto comportamiento del líquido y los procesos presentados en él, el número de resultados o modelos encontrados, puede verse en el resumen que se presenta al final en cada archivo de salida como se observa en la figura 5.12.

```

E:\TESIS 1\EJEMPLO DE MODELACIÓN\Ejemplo 1.phr.out - Notepad++
File Edit Search View Encoding Language Settings Macro Run TextFX Plugins Window ?
Ejemplo 1.phr Ejemplo 1.phr.out
150
151
152      Summary of inverse modeling:
153
154      Number of models found: 2
155      Number of minimal models found: 2
156      Number of infeasible sets of phases saved: 20
157      Number of calls to cll: 62
158
159      End of Run after 1.234 Seconds.
160
161
162
length: 7381 lines: 16 Ln: 6 Col: 1 Sel: 0|0 Dos\Windows ANSI INS

```

Figura 5.12. Resumen de la modelación inversa.

Fuente: (Elaboración propia).

Capítulo VI. Sitio de estudio.

El Parque Nacional Lagunas de Montebello (PNLM), es un área de gran importancia, ya que constituye una de las reservas naturales más importantes del estado de Chiapas, que tiene como función la regulación del clima y la conservación de los recursos de la zona y está constituido por alrededor de 60 lagos tanto perennes como intermitentes todos aparentemente conectados (Figueredo Rodríguez & Lara Hernandez, 2012; Mora Palomino et al., 2017). Ver figura 6.1.

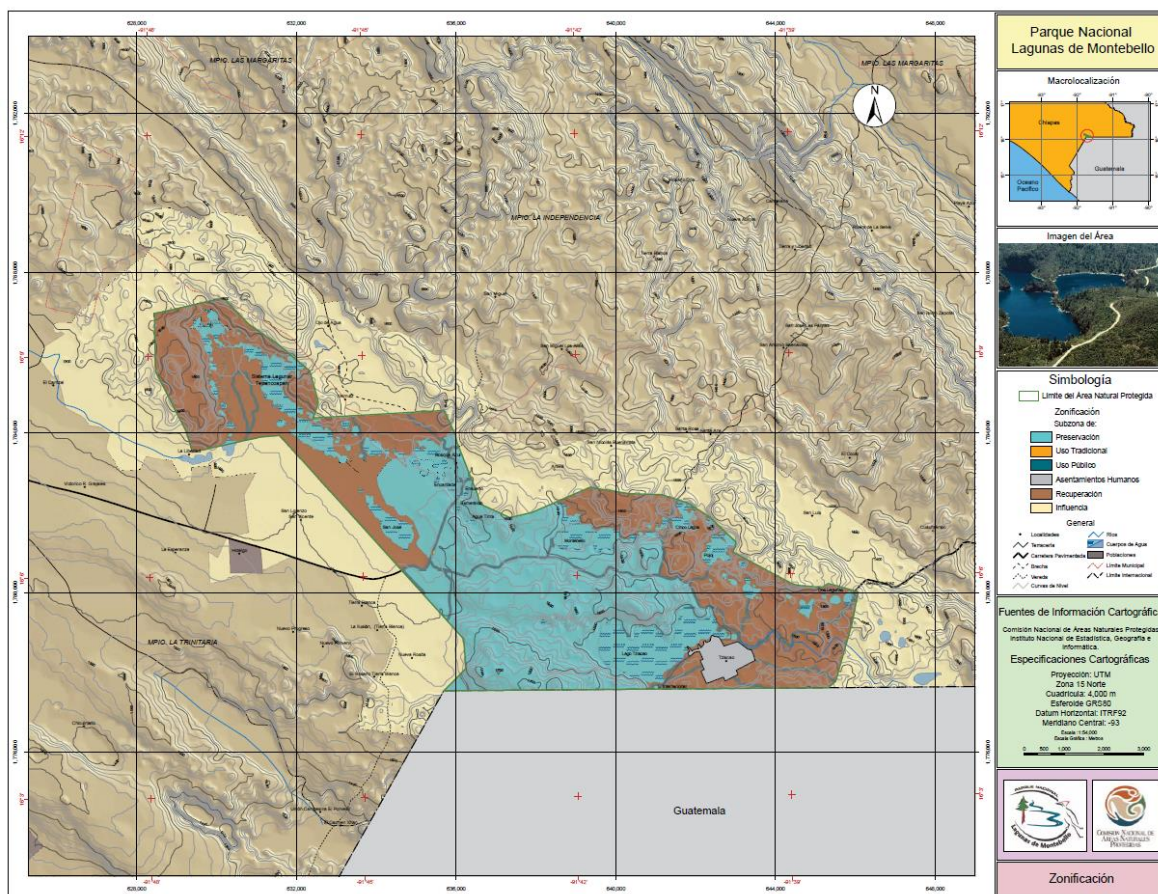


Figura 6.1. Ubicación: Parque Nacional "Lagunas de Montebello", Chiapas.
Fuente: (SEMARNAT, 2007).

Donde, actividades antrópicas se han considerado como factor de riesgo para esta región, haciendo que este sistema kárstico pueda dividirse en dos grupos de lagos: Un primero grupo con aguas cálcicas-magnésicas-bicarbonatadas-sulfatadas (Afectadas) y otro con aguas de tipo cálcica-magnésica-bicarbonatada (No afectadas), como se muestra en la figura 6.2. (Figueredo Rodríguez & Lara Hernandez, 2012; Mora Palomino et al., 2017).

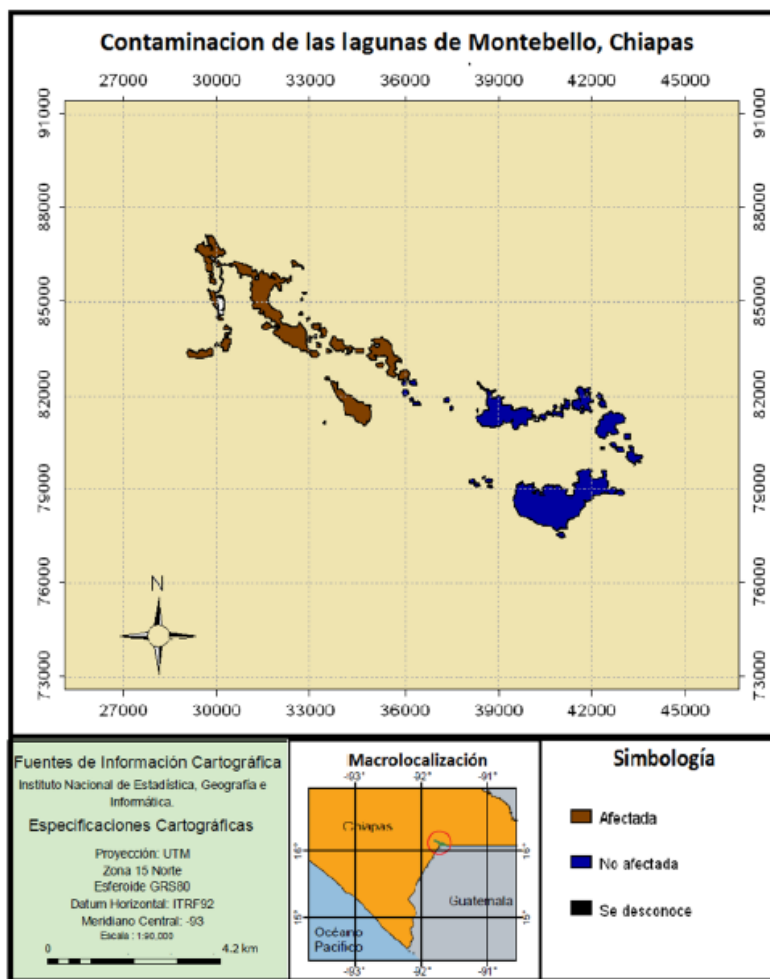
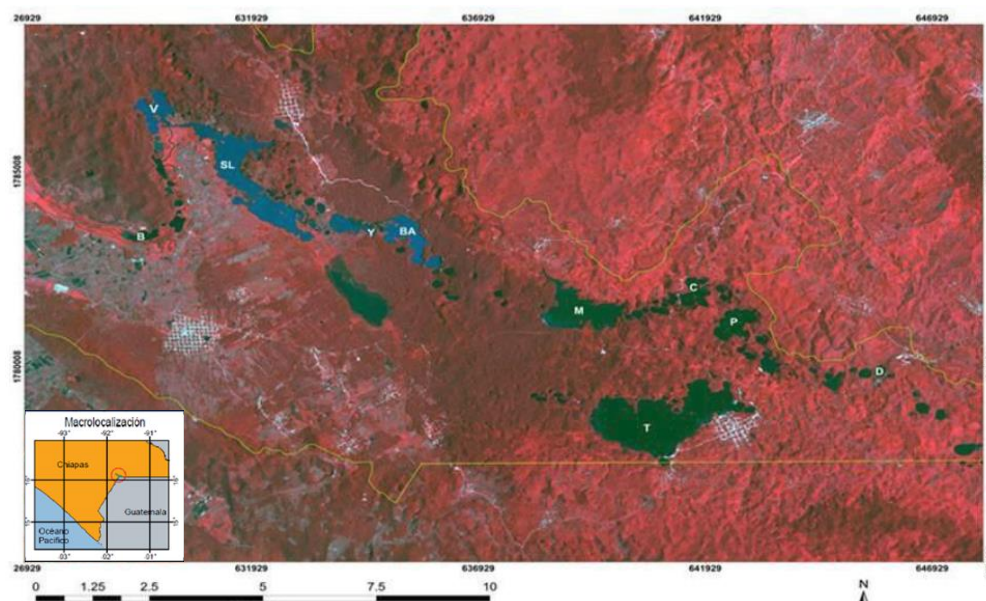


Figura 6.2. Caracterización de lagos respecto a su afectación.
Fuente: (Galicia Luna, 2012).

Las características del primer grupo, como se observa en la figura 6.3., pueden estar posiblemente relacionadas con la entrada de aguas con altas concentraciones de sulfatos y cloruros. Siendo así, el grupo de interés para este trabajo (Figueredo Rodríguez & Lara Hernandez, 2012; Mora Palomino et al., 2017). Este grupo de interés está compuesto por los siguientes lagos:

1. Balamtetic (B)
2. Vuelta el Agua (V)
3. San Lorenzo (SL)
4. Yalmus y (Y)
5. Bosque Azul (BA)



*Figura 6.3. Ubicación de los diferentes lagos (Caso de estudio).
Fuente: (Mora Palomino et al., 2017).*

VI.III. Geografía.

El Parque Nacional Lagunas de Montebello se localiza en la parte sur sureste del estado de Chiapas, en los límites con Guatemala; se ubica entre las coordenadas geográficas 16° 04' 40" y 16° 10' 20" latitud Norte y 91° 37' 40" longitud Oeste. Abarca una superficie del orden de 6,425 hectáreas, comprendida dentro de los municipios de La Trinitaria y La Independencia (Figueredo Rodríguez & Lara Hernandez, 2012).

Las variaciones de altitud resaltan a lo largo de toda la cuenca, llegando a alcanzar altitudes de hasta los 2400 m.s.n.m. en las partes más altas y descendiendo hasta los 1300 m.s.n.m., siendo en la parte baja donde se encuentran ubicadas los lagos de interés para este trabajo (CONAGUA, 2009).

La cuenca río Grande Lagunas de Montebello, sitio en donde se ubica el PNLN, cuenta con un total de 168 localidades con una población aproximada de 144,375 habitantes, este dato considera la población asentada en la región perteneciente a Guatemala, de dichas localidades 59 se encuentran en el municipio de Comitán, 67 en el municipio de La Trinitaria y 35 localidades en el municipio de La Independencia. También el municipio de Las Margaritas y Nenton en Guatemala, se integran 6 localidades del lado Mexicano y 1 del lado Guatemalteco, que en número de habitantes, constituyen un porcentaje mínimo de la región (Ver figura 6.1.) (CONAGUA, 2009).

Mediante el trabajo de Caracterización de Microcuencas, llevado a cabo por la Comisión Nacional del Agua, se realizó a división del territorio comprendido por la cuenca río Grande – Lagunas de Montebello en nueve microcuencas, de las cuales la microcuenca Ojo de Agua – San Lorenzo, (sitio donde se encuentran las lagunas de interés) es la de mayor tamaño, ocupando el 31.6% con respecto a la superficie total de la cuenca y abraza en su mayor parte los municipios de La Trinitaria y La Independencia, aquí se presentan también el mayor número de localidades (CONAGUA, 2009).

El complejo lacustre de tal microcuenca, se compone por 1200 hectáreas, se alimenta principalmente de forma subterránea y a través de canales superficiales entre los lagos. Dentro del complejo, se encuentran dos sistemas principales de lagos como se muestra en la figura 6.1., alimentados por las descargas del río Grande de Comitán a través de canales superficiales desde el lago Chinkultic, hasta el lago La Encantada, el otro sistema viaja en dirección opuesta desde Tziscoa hasta La Esmeralda, donde las conexiones ya no se reconocen a primera vista, aunque las conexiones de éstas, se presume son de manera subterránea y se conoce gracias a que pobladores demostraron su conectividad por medio de la introducción de cierto tipo de peces en determinado lago y que en cierto tiempo encontraban en otro lago que no había sido intervenido (Galicia Luna, 2012).

De la descripción presentada anteriormente, este trabajo considera solo el primer sistema, ya que este sistema ha sido considerado varias veces como sitio de estudio por el cambio de tonalidad que han presentado cada uno de los lagos.

VI.I. Características hidrogeológicas.

Con la finalidad de tener una primera aproximación del funcionamiento hidrogeológico conceptual, en el cual se mueve agua subterránea y su relación con el sistema lagunar Lagunas de Montebello, se realizó un reconocimiento geohidrológico, definiendo la geología de la zona y cada una de las unidades que la componen.

VI.I.1. Marco geológico regional.

La zona de interés pertenece a la provincia fisiográfica denominada Tierras Altas de Chiapas-Guatemala (Raisz E., 1964). Que comprende las subprovincias: Sierras Plegadas, Los Altos y Depresión Central Sierra de Chiapas, en ella están incluidas las ciudades de San Cristóbal de las Casas, Comitán y las Lagunas de Montebello.

Para definir el marco geológico regional de la zona de estudio, se tomó como base las cartas geológico-minera E15-11 Y E15-12-D15-3 del estado de Chiapas, realizadas por el Servicio Geológico Mexicano (SGM, 2005) y (SGM, 2006). Ver figura 6.4.

La cuenca Sierra de Chiapas, inicia su sedimentación con la Formación Todos Santos (JmLm-Ar) que consiste de una secuencia de limolita, arenisca y conglomerado del Jurásico Medio; la que es sobreyacida de manera discordante por caliza y dolomitas de la formación de la sierra madre (KapssCz-Do), las dolomitas son de color café a gris blanquecino, de aspecto sacaroide, con estratificación en capas gruesas o masivas y presentan intenso fracturamiento. Las calizas de color gris claro a café, de grano grueso, con capas de textura litográfica. Se les considera una edad Albiano-Cenomaniano del Aptiano-Santoniano, que a su vez es cubierta de forma concordante por caliza y lutita de la formación Ocozocuautila – Angostura (KcmCz-Lu) (SGM, 2006). Figura 6.4.

Hacia finales del Plioceno y en el Pleistoceno ocurren depósitos, en una cuenca evaporítica, de yeso, conglomerado polimíctico y limolita (TplQptY-Cgp) (SGM, 2005).

Los depósitos recientes están constituidos por aluvión (Qhoal) que se encuentra en el lecho de los ríos, también en el Pleistoceno se depositó un conglomerado polimíctico (QptCgp) el cuál se puede encontrar en determinados puntos dentro del área de estudio. Figura 6.4.

VI.I.2. Geología local.

En el área lagunar se encuentran aflorando rocas constituidas por dolomitas y calizas de la Formación Sierra Madre de edad Albiano-Cenomaniano, de color café a gris blanquecino, de aspecto sacaroide, fracturadas, con estratificación en capas gruesas a masiva. Las calizas son de color gris claro a café, de grano grueso, con capas de textura litográfica (López-Ramos, 1981).

Al norte y sur del área de estudio, se encuentran aflorando rocas calcáreas del Cretácico Superior de la Formación Angostura, constituidas por biomicritas, brechas sedimentarias y calizas de rudistas (López-Ramos, 1981)

Hacia el norte y noreste, el subsuelo está constituido por arenas, arcillas y conglomerados rojizos del Pleistoceno, así como sedimentos aluviales y suelos lateríticos de poco espesor de edad Reciente. En el área del parque se presenta material de relleno de tipo arcillo arenoso, de poco espesor cubriendo a las rocas calcáreas de la Formación Sierra Madre.

En el área de estudio se localizan dos fallas principales (Falla El Naranjo y Falla Juncaná), con rumbo NW-SE, que originan una fosa tectónica o graben formando el valle del Río Grande.

También se identificaron familias de fracturas con el mismo rumbo (NW-SE), de las fallas mencionadas, así como fracturas perpendiculares a las anteriores, con rumbo NE-SW, estas últimas asociadas al sistema de fallas Polochic-Motagua.

El Río Grande (en el área de estudio) y algunas porciones del sistema lagunar, se han formado en las zonas de debilidad causadas por ambos sistemas de fracturamiento, Figura 6.4.

Además es muy notoria la presencia de dolinas, formadas por la disolución de las calizas por meteorización química, es decir, el carbonato de calcio de las calizas es disuelto por la acción de aguas ácidas. El agua subterránea también disuelve las rocas calcáreas que llegan a formar cuevas y galerías por donde se infiltra el agua, Figura 6.4.

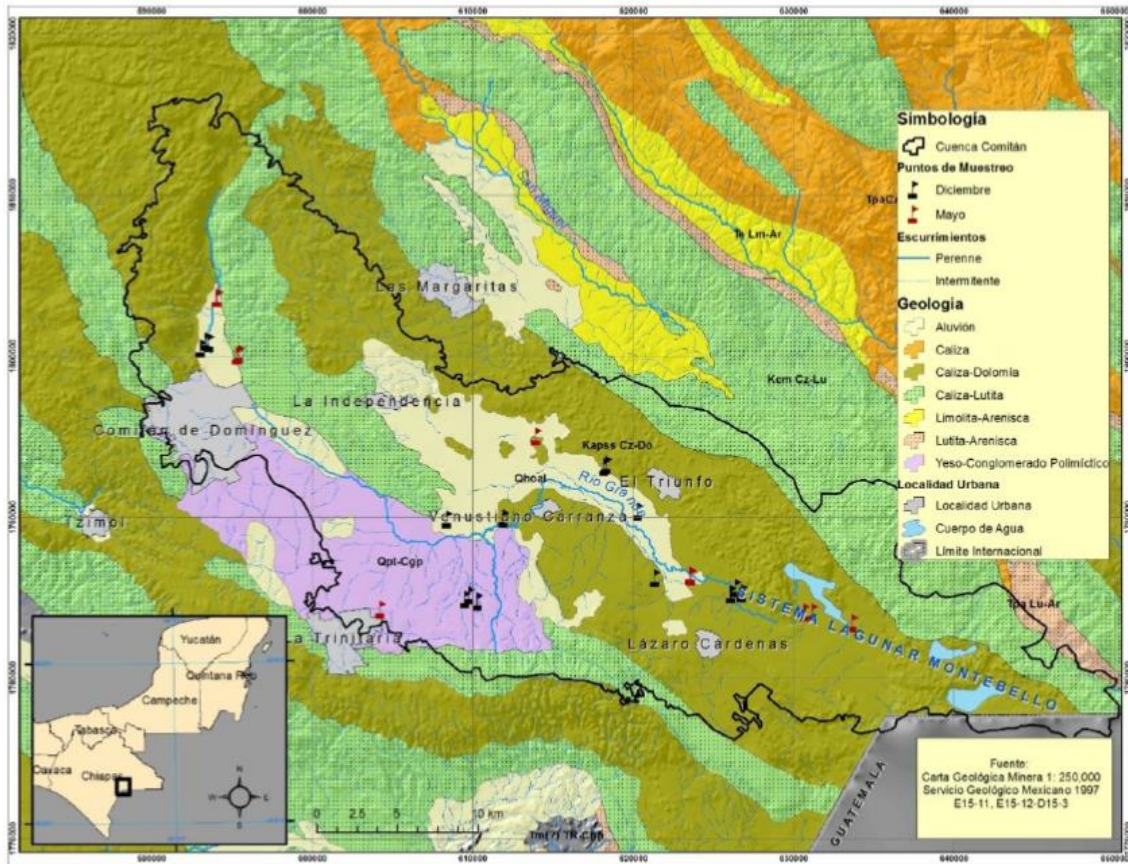


Figura 6.4. Mapa geológico de la cuenca.
Fuente: (Galicia Luna, 2012).

VI.II. Geomorfología.

Debido a la afectación por parte de las fallas y la intensa fracturación de las calizas, la evolución geomorfológica del Parque Nacional Lagunas de Montebello se ha desarrollado a un paisaje kárstico (Durán et al., 2014).

Compuesto de un total de 17 unidades geomorfológicas, agrupadas y divididas en 4 clasificaciones (Ver figura 6.5.):

Endógeno plegado: Es un conjunto representado por lomeríos y laderas de montaña, estructuras correspondientes a regiones montañosas derivadas de la actividad tectónica, cada una de estas laderas y lomeríos, se encuentran distribuidas en la zona de estudio y en algunos casos, llegan a alcanzar los 1600 msnm. Con pendientes de hasta 67°, y cada elevación tiene estratos desarrollados sobre secuencias del Paleoceno y del Cretácico, que en su totalidad según estudios, está conformado por rocas calcáreas (Durán et al., 2014).

Exógeno acumulativo: Son de una geometría tabular o superficies en transición entre los sistemas montañosos y las planicies, con pendientes en forma de rampa que no pasa de los 25°, y son regularmente atravesadas por una o varias corrientes fluviales, esto da lugar a que sus formas sean producto de la sedimentación continua de diversos materiales no consolidados como el aluvión y el coluvión (Durán et al., 2014).

Exógeno denudativo fluvio-kárstico: Los agentes modeladores principales de este grupo, son: el agua, la gravedad, el clima y el control tectónico, son apreciados en todo el Parque y a su vez, cada unidad que lo compone se trata de una serie de superficies alargadas que comúnmente han servido para el paso del agua y que al sufrir erosión, las paredes de estos canales tienen pendientes entre los 35° y 55° y su evolución se da en secuencias calcáreas (caliza, dolomía y lutita) (Durán et al., 2014).

Exógeno denudativo kárstico: La intensa actividad de los procesos kársticos da la forma a estas estructuras distribuidas por toda la región y que siguen preferentemente los lineamientos tectónicos, entre las unidades pertenecientes a este grupo se encuentran, las Dolinas, Uvalas y el Polje, en donde las primeras depresiones, se caracterizan por sus formas variadas que van desde redondeadas hasta elípticas irregulares, y a la unión de dos o más Dolinas se le da el nombre de Uvala; por esto es común encontrar Dolinas situadas a escasos 100 m de una Uvala, ambas se desarrollan sobre materiales carbonatados, cretácicos y cuaternarios en alturas entre los 1400 y 1600 msnm. El último tipo de depresión, es de forma alargada e irregular con un fondo plano y paredes escarpadas cubierto de materiales cuaternarios (Durán et al., 2014).

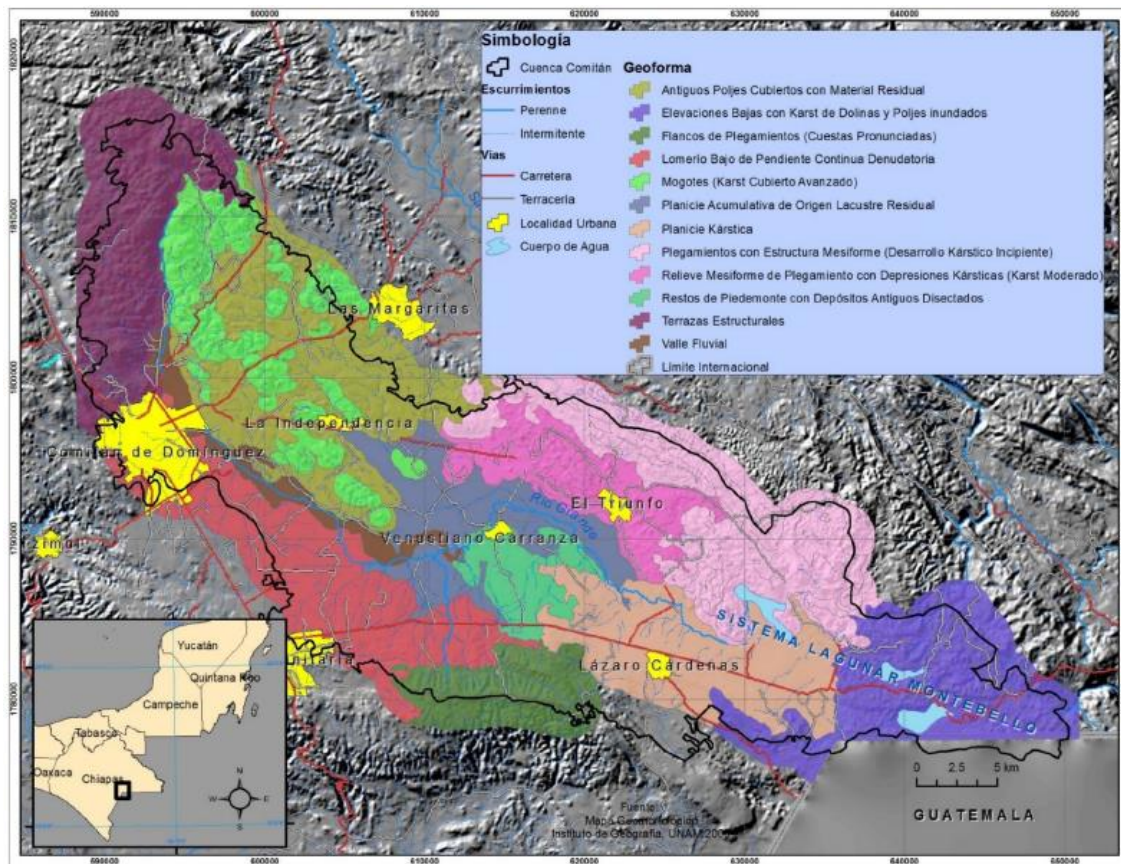


Figura 6.5. Mapa de unidades Geomorfológicas de la cuenca.
Fuente: (Durán et. al., 2014).

VI.IV. Clima.

El clima es uno de los factores principales en la modificación o formación de la karstificación y sus formas resultantes, ya que los factores climáticos determinantes de las características del karst son: la humedad, la circulación del aire y la temperatura (Martínez M. A., 2015).

En el PNLM, se presenta un clima de acuerdo con la Clasificación Climática de Köppen (Figura 6.6.) de tipo C(fm) templado húmedo con lluvias todo el año y en el extremo Noroeste A(cm) cálido húmedo con abundantes lluvias en verano (Ver figura 6.7.: La temperatura media mensual es de 23.6 °C con una oscilación térmica anual de 5.6 °C, el mes más frío es enero con un promedio de 20.9 °C y el más cálido abril con un promedio mensual de 25.6 °C (SEMARNAT, 2007).

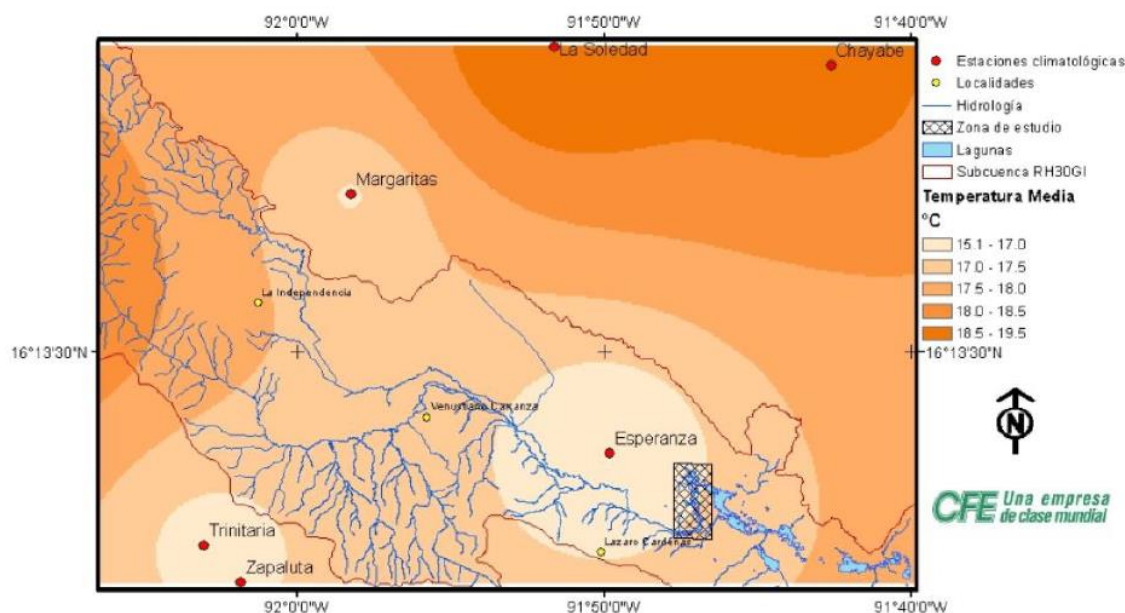


Figura 6.6. Temperaturas promedio en la cuenca.
Fuente: (Figueredo Rodríguez & Lara Hernandez, 2012)

La precipitación anual en la región es de 1862 mm, distribuidos en dos periodos, uno de alta humedad y el otro de relativa sequía, de mayo a diciembre donde llueve un promedio de 1,716 mm que representa el 92% de la precipitación total anual y los meses restantes, donde el 8% es representado por una precipitación que se distribuye en escasas lluvias, de 146 mm (Figura 6.9.) (SEMARNAT, 2007; Galicia Luna, 2012).

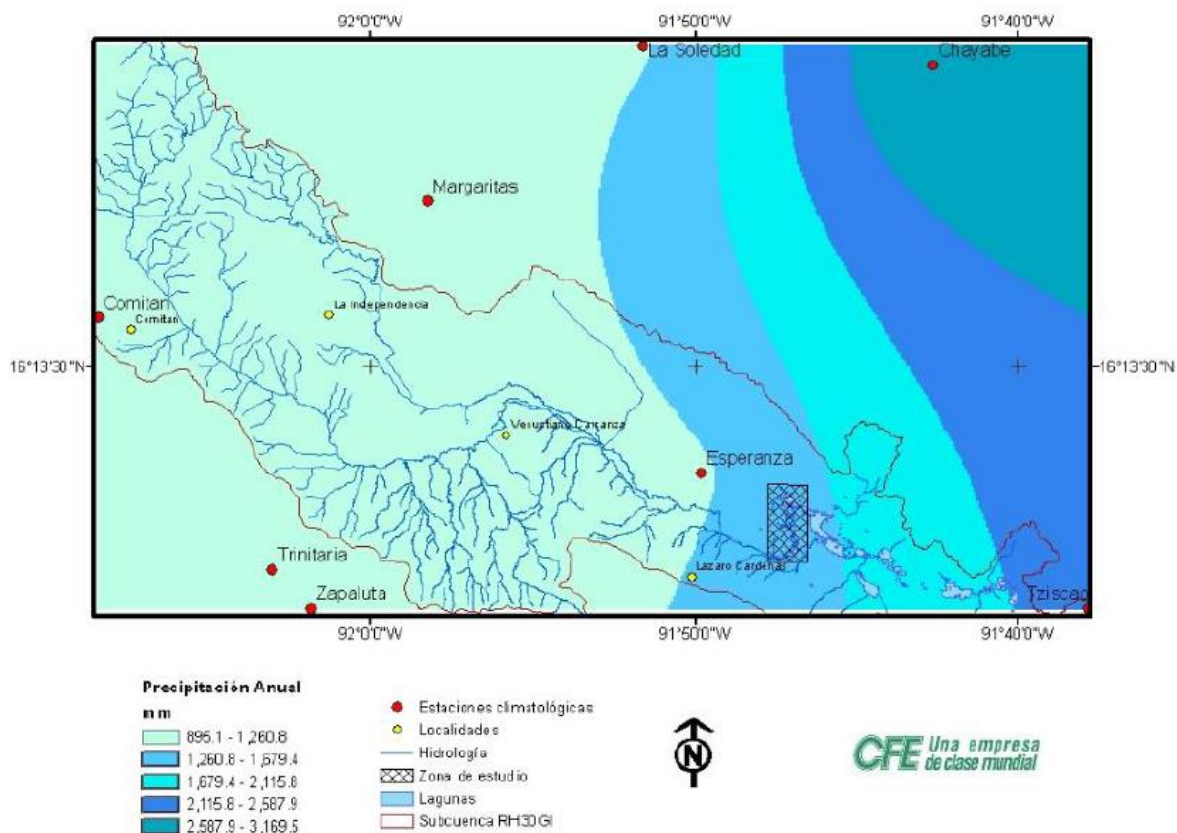


Figura 6.7. Distribución promedio de la precipitación anual en la cueca.

Fuente: (Figueredo Rodríguez & Lara Hernandez, 2012)

El mes más húmedo es septiembre y la frecuencia de la dirección del viento es principalmente del sur, sin llegarse a presentar heladas (SEMARNAT, 2007).

VI.V. Flora.

Los tipos de vegetación establecidos en la cuenca Río Grande – Lagunas de Montebello son de bosque mixto, pino-encino, pino-encino-liquidámbar, así como bosques de pino y bosques de encino, se suman a esta lista en menos proporción bosques fragmentados de pinos, encinares y en su mayor parte vegetación secundaria con elementos del género acacia y matorrales con diversas especies cactáceas y zonas de cultivo (Martínez M. A., 2015).

En el caso de la agricultura, los productos como maíz, frijol y calabaza, componen el principal sistema agroproductivo ocupando dos tercios de la superficie sembrada anualmente y en sistema de temporal, aunque también existen zonas ocupadas por maíz, tomate y otras hortalizas con riego, de las cuales se ha desarrollado últimamente el cultivo de jitomate y se ha convertido en la actividad de mayor importancia para localidades como El Triunfo, La Esperanza y El

Porvenir Agrarista, aunque esto ha ocasionado problemas ambientales debido al uso de agroquímicos que contaminan los cuerpos de agua y la sustitución de los bosques por áreas de cultivo (SEMARNAT, 2007; Martínez, 2015).

La comunidad vegetal más importante es el bosque de coníferas. Del cual la especie más abundante es *Pinus oocarpa*, localizada en el centro y Noroeste del Parque, se desarrolla sobre terrenos someros y en localidades con precipitación anual por debajo de los 1,200 mm y la riqueza de especies leñosas en el Parque Nacional Lagunas de Montebello, está representada por 208 variedades, lo cual representa un número alto ya que está distribuido en una región relativamente pequeña, en la tabla 6.1. se representa un resumen de la transformación del uso de suelo y la cobertura vegetativa del lugar para el año 2005, la tabla mostrada a continuación, en comparación a los últimos 20 años, demuestra que los bosques se han reducido en un 51.26%, las selvas en 22.65% en tanque que la actividad agrícola se ha desarrollado en un 23.94% (SEMARNAT, 2007; Martínez, 2015).

Tabla 6.1. Transformación de los usos de suelo en PNLM.

Clase	Área m ²	Hectáreas-áreas-centiáreas	ha	%
Bosques con vegetación secundaria	20913837.5	2,091-38-37.5	2,091	32.54
Bosques sin vegetación secundaria	26163316.8	2,616-33.16.8	2,616	40.72
Agricultura y pastizal inducido	5784310.98	578-43-10.98	578	9
Cuerpos de agua	10304853.5	1,030-48-53.45	1,030	16.03

Fuente: (SEMARNAT, 2007).

VI.VI. Fauna.

Este recinto, alberga un estimado del 4% de la riqueza total de toda la república Mexicana entre especies como: mariposas, anfibios, reptiles, aves y mamíferos, lo cual a su vez, representa el 8.34% del total estimado para el estado de Chiapas, registros actuales indican una población de 102 especies de invertebrados y alrededor de nueve especies de peces, 15 de anfibios, 35 de reptiles, 277 de aves y 65 especies de mamíferos, que en conjunto representan las 518 especies de vertebrados (SEMARNAT, 2007).

Se ha intentado reconocer cada grupo mencionado mediante la realización de estudios ecológicos particularmente la ecología de comunidades y las poblaciones de mamíferos pequeños, en el caso de los anfibios y reptiles, aún se requiere de un mejor estudio y los peces son el grupo de especies vertebradas con menos estudio. Aunque se tiene conocimiento de especies endémicas como: el ratón chiapaneco (*Peromyscus zarhynchus*); el leoncillo (*Herpailurus yagouaroundi*) y el tigrillo (*Leoparus wieddi*), que se caracterizan por ser especies amenazadas y en peligro de extinción local (SEMARNAT, 2007).

Al ser las aves el grupo más numeroso en especies, se distinguen en el Parque siete especies de pájaros carpinteros, de los cuales dos tienen categoría de

protección especial, estos son; (*Campephilus guatemalensis* y *Melanerpes formicivorus*) y una especie probablemente ya extinta (*Colaptes auratus*), este control se da bajo la NOM-059-SEMARNAT-2001, para una mejor representación ver tabla 6.2.

Tabla 6.2. Cuadro de especies del PNLM.

	Total en el ANP	Amenazadas	Protección especial	Probablemente extintas	Peligro de extinción	Total en la NOM-059-SEMARNAT-2001	Endémica para México
Peces	9	1	1	0	0	2	1
Reptiles	35	1	4	0	0	5	1
Anfibios	15	4	7	0	0	11	4
Aves	277	23	41	4	2	64	19
Mamíferos	65	3	3	0	2	8	1
Flora	261	6	6	0	4	16	0
Insectos	117	0	0	0	0	0	0
Totales	779	38	62	4	8	106	26
Porcentaje con respecto al total de especies en el ANP	100	4.87	7.95	0.51	1.02	13.6	3.33

Fuente: (SEMARNAT, 2007)

Capítulo VII. Identificación de los procesos principales.

VII.I. Recopilación de datos.

De acuerdo a información obtenida por parte de la comisión encargada de realizar el muestreo en el mes de agosto de 2014, después de realizar la investigación bibliográfica, en medios digitales e impresos sobre el sitio se procedió a la consulta de procedimientos de toma de muestras de agua, en la Guía de muestreo de Aguas Subterráneas de la CONAGUA, 1999 (Olea, 2015).

La selección de los 24 puntos de muestreo tomadas a los lagos, fue determinado mediante imágenes satelitales y verificado en sitio, cuidando que cada una de las muestras se recolectara al eje central del cuerpo de agua mediante el siguiente proceso:

A bordo de una lancha de remos, se recolectaron muestras con bote muestreador de acrílico de 2 lt, a 1 m de profundidad, siguiendo la Guía de muestreo de Aguas Subterráneas de la CONAGUA, 1999 y las especificaciones del laboratorio encargados de determinar los iones, nutrientes y el carbono total.

Para la determinación de los cationes, las muestras contenidas en tubos de ensayo, fueron filtradas a 45 μm , agregando dos gotas de HNO_3 , manteniendo la muestra a 4 $^{\circ}\text{C}$, en el caso de los aniones también se filtraron a 45 μm , sin acidificarse y a la misma temperatura.

Los nutrientes (nitratos y fosfatos), para su determinación requirieron filtrar la muestra a 45 μm , agregando una gota de cloroformo y en el caso del carbono orgánico total (COT), no se aplicó filtrado, ni acidificado y ambas se mantuvieron a una temperatura de 4 $^{\circ}\text{C}$.

Una vez realizado el proceso de muestreo, cada uno de los ejemplares se almacenó y trasladó a las instalaciones de la UNAM ubicadas en la CDMX, manteniéndose siempre a una temperatura constante de 4 $^{\circ}\text{C}$.

Los datos obtenidos de la determinación físico-química realizada a cada una de las muestras, fueron almacenados de manera ordenada respetando la dirección del flujo que conecta los diferentes cuerpos de agua, como se observa en la tabla 7.1.

Cada una de las muestras puede encontrarse en la base de datos, y de estas se describe su clave numérica, lago al que pertenece, posición geográfica, la temperatura a la que se encontraba en el momento del muestreo, la conductividad eléctrica (CE) y el pH medido “in situ”, así como el valor de los iones principales resultado de los análisis químicos realizados por los laboratorios correspondientes expresados en mg/l o ppm entre los que se encuentran: sodio Na^+ , potasio K^+ , calcio Ca^{2+} , magnesio Mg^{2+} , bicarbonatos HCO_3^- , cloruros Cl^- y sulfatos SO_4^{2-} .

También se incluye la determinación de los índices de saturación (IS), determinados por medio del software PHREEQC, como: calcita, dolomita y yeso, además de las concentraciones de Nitrato NO_3^- , Nitrito NO_2^- y Amonio NH_4^+ .

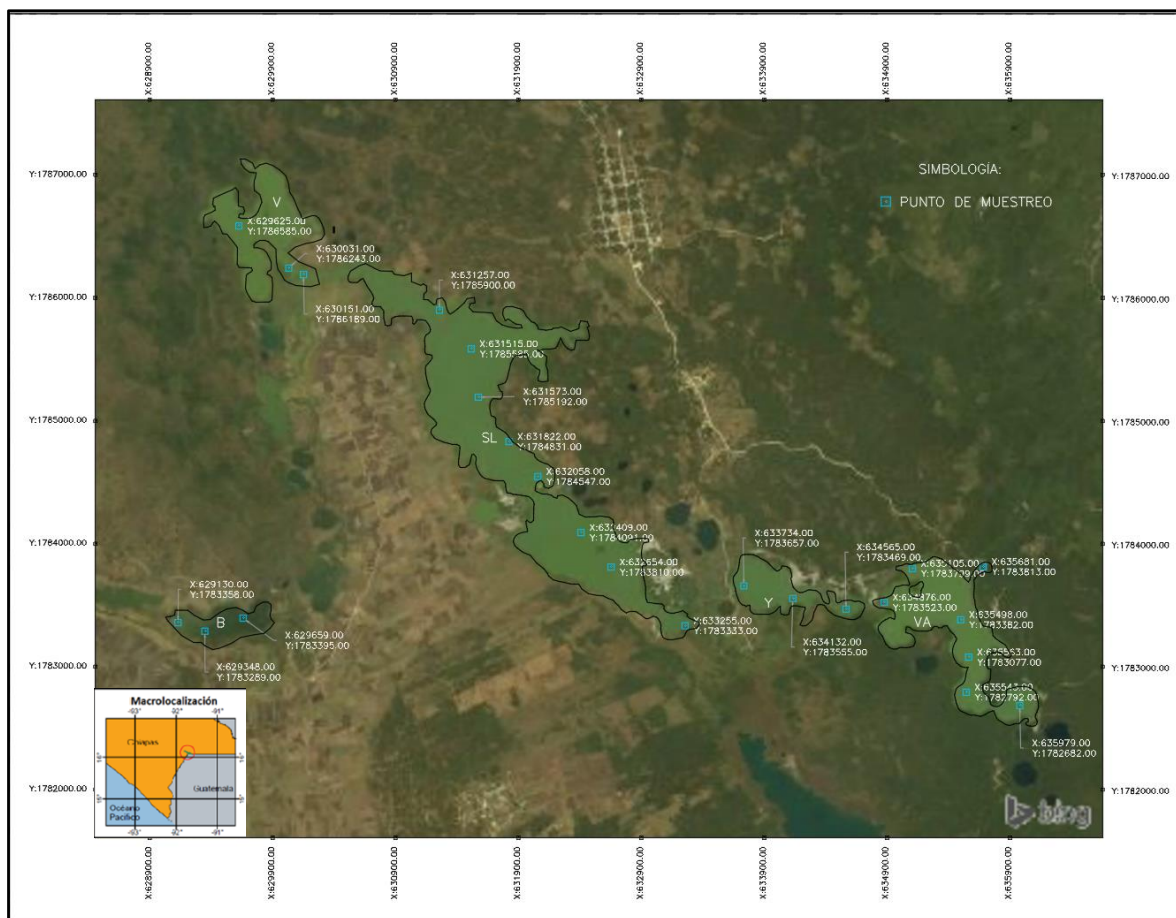


Figura 7.1. Puntos de muestreo con coordenadas en sistema UTM.
Fuente: Muestreo realizado en agosto, 2014.

VII.II. Análisis estadístico.

Para tener una mayor certeza de los datos que se incluirán en la modelación, es necesario tener un análisis estadístico que describa mejor cada uno de los cuerpos de agua de las que fueron adquiridas las muestras, esto, con el propósito de ayudar al modelador a entender mejor el comportamiento del trayecto muestreado y los resultados de la modelación al momento de interpretarlos.

Esta consideración, se representa en la tabla 7.2., en la cual se muestran para cada uno de los cuerpos de agua, características estadísticas como: el máximo valor de cada parámetro, la media, la desviación estándar, el percentil 75 y el percentil 95. Cada uno de estos, obtenido mediante la herramienta de XLSTAT.

XLSTAT, es una herramienta de solución estadística complemento de Microsoft Excel, encargada de realizar de una manera más sencilla una amplia variedad de funciones para mejorar las funciones de análisis de Excel (Addinsoft, 2017).

Para fines de este trabajo, el análisis tanto gráfico, como la modelación, se recurre al dato estadístico conocido como “media”, ya que ésta representa un promedio de los valores obtenidos para cada una de las muestras, y de este modo la introducción de datos al modelo se encontrará en condiciones óptimas, lo que mejora el procesamiento de datos e incrementa el valor de la certidumbre, por lo tanto la determinación de las reacciones mediante el análisis numérico para satisfacer las condiciones de equilibrio, será más acertado y ayudará a una mejor determinación de las condiciones del sitio de estudio.

IDENTIFICACIÓN DE LOS PROCESOS PRINCIPALES.

Tabla 7.1.: Representación estadística del muestreo realizado al grupo de lagunas afectadas en el PNLM.

Laguna	Muestra	Clave de campo	T (°C)	pH	CE	Na+	NH4+	K+	Ca2+	Mg2+	HCO3-	Cl ⁻	NO3-	SO42-	CALCITA	DOLOMITA	YESO	N-NH4	N-NO3	N-NO2
Balamtetic-Tepancoapan	250	BT01	25.4	9.17	655	19.55	0.01	4.09	87.44	28.96	183.17	42.74	0.01	137.84	1.63	3.16	-1.47	0.010	0.308	0.006
Balamtetic-Tepancoapan	251	BT02	25.2	9.43	702	15.93	0.13	3.30	83.28	32.16	159.09	22.24	0.01	192.04	1.69	3.33	-1.37	0.002	0.019	0.001
Balamtetic-Tepancoapan	252	BT03	25.1	9.3	721	15.43	0.01	3.29	102.33	35.59	140.40	41.17	0.01	219.17	1.63	3.15	-1.24	0.012	0.034	0.003
Vuelta el agua	238	V01	26.6	8.83	757	7.81	0.44	2.84	106.76	41.43	100.19	4.21	0.01	324.61	1.18	2.31	-1.07	0.014	0.007	0.003
Vuelta el agua	239	V02	27.3	8.86	743	7.24	2.64	2.74	94.96	38.95	92.58	4.61	0.01	328.18	1.14	2.25	-1.11	0.005	0.000	0.000
Vuelta el agua	240	V03	27.5	9.06	661	7.35	0.22	2.63	94.79	37.48	91.10	4.13	0.01	313.30	1.28	2.52	-1.13	0.002	0.001	0.000
San Lorenzo	242	S02	26.2	9.1	621	8.49	0.01	3.08	86.11	30.15	154.30	7.10	0.01	211.80	1.51	2.93	-1.30	0.012	0.005	0.001
San Lorenzo	243	S03	24.9	9.05	627	8.03	0.01	2.68	89.31	27.27	147.50	6.80	0.01	198.60	1.46	2.77	-1.30	0.417	0.405	0.027
San Lorenzo	244	S04	24.5	9.08	632	8.36	0.11	2.65	85.57	28.93	147.60	7.60	0.01	211.90	1.46	2.80	-1.30	0.339	0.519	0.031
San Lorenzo	245	S05	24.7	9.06	622	5.46	0.01	1.68	83.96	17.06	97.50	4.70	0.01	174.60	1.30	2.25	-1.34	0.002	0.003	0.000
San Lorenzo	246	S06	24.2	9.12	627	9.03	0.13	2.93	94.34	29.89	163.50	8.90	0.01	214.30	1.56	2.96	-1.26	0.017	0.008	0.001
San Lorenzo	247	S07	24.1	9.04	608	6.66	0.01	2.19	79.03	21.76	136.30	6.40	0.01	172.90	1.39	2.56	-1.38	0.008	0.006	0.001
San Lorenzo	248	S08	23.6	9.06	611	8.32	0.01	3.03	84.09	28.40	128.70	7.20	0.01	194.30	1.38	2.63	-1.33	-0.001	0.001	0.000
San Lorenzo	249	S09	26.7	9.01	588	11.75	0.62	3.02	73.50	20.07	135.10	8.80	0.01	152.70	1.37	2.55	-1.45	0.011	0.003	0.001
Yalmus	235	Y01	27.8	9	542	7.30	0.15	2.43	85.04	26.14	150.47	4.44	0.01	191.02	1.45	2.77	-1.33	0.011	0.001	0.000
Yalmus	236	Y02	25.3	8.98	540	7.98	0.36	3.04	75.60	27.04	136.44	4.73	0.01	181.64	1.33	2.57	-1.39	0.011	0.001	0.001
Yalmus	237	Y03	25.2	8.98	544	7.61	0.01	2.26	78.71	27.07	149.56	4.18	0.01	180.94	1.38	2.66	-1.38	0.011	0.007	0.002
Bosque Azul	227	B01	26.1	8.68	504	6.51	0.15	2.48	74.40	23.99	147.81	4.21	0.01	165.58	1.14	2.15	-1.42	0.016	0.007	0.001
Bosque Azul	228	B02	24.9	8.77	510	6.82	0.16	2.36	75.83	24.29	147.44	4.30	0.01	162.19	1.21	2.27	-1.42	0.004	0.001	0.000
Bosque Azul	229	B03	26.8	8.76	484	6.98	0.01	2.37	73.91	24.24	146.64	4.31	0.01	162.53	1.21	2.30	-1.43	0.017	0.008	0.001
Bosque Azul	230	B04	26.3	8.75	483	6.47	0.14	2.35	73.44	23.95	141.79	4.26	0.01	154.65	1.18	2.24	-1.45	0.012	0.007	0.001
Bosque Azul	231	B05	26.5	8.78	483	6.19	0.10	2.33	67.85	23.01	143.57	4.29	0.01	151.37	1.19	2.27	-1.48	0.019	0.012	0.001
Bosque Azul	232	B06	26.6	8.9	453	5.90	0.10	2.16	65.11	22.60	147.32	4.13	0.01	132.38	1.28	2.48	-1.55	0.018	0.012	0.001
Bosque Azul	233	B07	22.9	8.77	520	6.64	0.38	2.43	74.75	23.77	153.71	4.25	0.01	162.55	1.20	2.23	-1.42	0.013	0.095	0.001

Fuente: Elaboración propia.

Tabla 7.2.: Análisis estadístico del muestreo realizado al grupo de lagunas afectadas en el PNLM.

Laguna	Estadísticos	Temp.	pH	CE	Na+	NH4+	K+	Ca2+	Mg2+	HCO3-	Cl ⁻	NO3-	SO42-	CALCITA	DOLOMITA	YESO	N-NH4	N-NO3	N-NO2
		°C			mg/l														
Balamtetic-Tepancoapan	Mínimo	25.10	9.17	655	15.43	0.01	3.29	83.28	28.96	140.40	22.24	0.01	137.84	1.63	3.15	-1.47	0.002	0.019	0.001
	Máximo	25.40	9.43	721	19.55	0.13	4.09	102.33	35.59	183.17	42.74	0.01	219.17	1.69	3.33	-1.24	0.012	0.308	0.006
	Media	25.23	9.30	693	16.97	0.05	3.56	91.02	32.24	160.89	35.38	0.01	183.02	1.65	3.21	-1.36	0.008	0.120	0.003
	Desviación típica (n)	0.12	0.11	28	1.83	0.06	0.38	8.18	2.71	17.51	9.32	0.00	33.81	0.03	0.08	0.09	0.005	0.133	0.002
	Percentil 75%	25.30	9.37	712	17.74	0.07	3.70	94.89	33.88	171.10	41.96	0.01	205.60	1.66	3.25	-1.31	0.011	0.171	0.0045
	Percentil 95%	25.38	9.42	719	19.19	0.12	4.01	100.80	35.25	180.80	42.58	0.01	216.50	1.68	3.31	-1.25	0.0118	0.281	0.0057
Vuelta el agua	Mínimo	26.60	8.83	661	7.24	0.22	2.63	94.79	37.48	91.10	4.13	0.01	313.30	1.14	2.25	-1.13	0.002	0.000	0.000
	Máximo	27.50	9.06	757	7.81	2.64	2.84	106.76	41.43	100.19	4.61	0.01	328.18	1.28	2.52	-1.07	0.014	0.007	0.003
	Media	27.13	8.92	720	7.47	1.10	2.73	98.84	39.28	94.62	4.32	0.01	322.03	1.20	2.36	-1.10	0.007	0.003	0.001
	Desviación típica (n)	0.386	0.10	42	0.25	1.09	0.09	5.60	1.63	3.98	0.21	0.00	6.34	0.06	0.12	0.02	0.005	0.003	0.001
	Percentil 75%	27.4	8.96	750	7.58	1.54	2.79	100.9	40.19	96.39	4.41	0.01	326.4	1.23	2.415	-1.09	0.0095	0.004	0.0015
	Percentil 95%	27.48	9.04	755.6	7.764	2.42	2.83	105.6	41.18	99.43	4.57	0.01	327.8	1.27	2.499	-1.074	0.0131	0.0064	0.0027
San Lorenzo	Mínimo	23.60	9.01	588	5.46	0.01	1.68	73.50	17.06	97.50	4.70	0.01	152.70	1.30	2.25	-1.45	-0.001	0.001	0.000
	Máximo	26.70	9.12	632	11.75	0.62	3.08	94.34	30.15	163.50	8.90	0.01	214.30	1.56	2.96	-1.26	0.417	0.519	0.031
	Media	24.86	9.07	617	8.26	0.11	2.66	84.49	25.44	138.81	7.19	0.01	191.39	1.43	2.68	-1.33	0.101	0.119	0.008
	Desviación típica (n)	1.00	0.03	13	1.71	0.20	0.46	5.86	4.73	18.81	1.26	0.00	21.05	0.08	0.22	0.06	0.161	0.200	0.012
	Percentil 75%	25.23	9.085	627	8.625	0.115	3.023	86.91	29.17	149.3	7.9	0.01	211.8	1.473	2.833	-1.3	0.0975	0.107	0.0075
	Percentil 95%	26.53	9.113	630.3	10.8	0.449	3.063	92.58	30.06	160.3	8.865	0.01	213.5	1.543	2.95	-1.274	0.39	0.479	0.0296
Yalmus	Mínimo	25.20	8.98	540	7.30	0.01	2.26	75.60	26.14	136.44	4.18	0.01	180.94	1.33	2.57	-1.39	0.011	0.001	0.000
	Máximo	27.80	9.00	544	7.98	0.36	3.04	85.04	27.07	150.47	4.73	0.01	191.02	1.45	2.77	-1.33	0.011	0.007	0.002
	Media	26.10	8.99	542	7.63	0.17	2.58	79.79	26.75	145.49	4.45	0.01	184.53	1.39	2.67	-1.37	0.011	0.003	0.001
	Desviación típica (n)	1.20	0.01	2	0.28	0.14	0.33	3.93	0.43	6.41	0.22	0.00	4.60	0.05	0.08	0.03	0.000	0.003	0.001
	Percentil 75%	26.55	8.99	543	7.795	0.255	2.735	81.88	27.06	150	4.585	0.01	186.3	1.415	2.715	-1.355	0.011	0.004	0.0015
	Percentil 95%	27.55	8.998	543.8	7.943	0.339	2.979	84.41	27.07	150.4	4.701	0.01	190.1	1.443	2.759	-1.335	0.011	0.0064	0.0019
Bosque Azul	Mínimo	22.90	8.68	453	5.90	0.01	2.16	65.11	22.60	141.79	4.13	0.01	132.38	1.14	2.15	-1.55	0.004	0.001	0.000
	Máximo	26.80	8.90	520	6.98	0.38	2.48	75.83	24.29	153.71	4.31	0.01	165.58	1.28	2.48	-1.42	0.019	0.095	0.001
	Media	25.73	8.77	491	6.50	0.15	2.35	72.19	23.69	146.90	4.25	0.01	155.89	1.20	2.28	-1.45	0.014	0.020	0.001
	Desviación típica (n)	1.29	0.06	21	0.34	0.10	0.09	3.74	0.59	3.48	0.06	0.00	10.67	0.04	0.09	0.04	0.005	0.031	0.000
	Percentil 75%	26.55	8.775	507	6.73	0.155	2.4	74.58	24.12	147.6	4.295	0.01	162.5	1.21	2.285	-1.42	0.0175	0.012	0.001
	Percentil 95%	26.74	8.864	517	6.932	0.314	2.465	75.51	24.28	151.9	4.307	0.01	164.7	1.259	2.426	-1.42	0.0187	0.0701	0.001

Fuente: Elaboración propia.

VII.III. Análisis gráfico.

Antes de llevar a cabo la modelación, es necesario tener un conocimiento previo del tipo de agua que predomina en la región, así como las principales diferencias entre los cuerpos de agua seleccionados que permita la identificación de los procesos químicos que determinan las condiciones del grupo de lagos afectados.

Para este caso, se hizo uso de los diagramas de Piper-Hill y de Stiff para la comparación de lagos, el tipo de aguas contenidas en cada cuerpo y su comportamiento a lo largo del flujo. Cada uno de estos diagramas fue elaborado mediante la herramienta HatariChem, la cual puede encontrarse en la siguiente página web:

hatarichem.hidahatari.com

Esta aplicación contiene un algoritmo capaz de crear los diferentes diagramas a partir de una base de datos proporcionada por el usuario.

De acuerdo al capítulo II, los diagramas de Stiff son de gran utilidad al comparar diferentes tipos de agua, por tal, en las figuras 7.2. a la 7.6. se representan los diagramas de Stiff para cada lago en estudio.

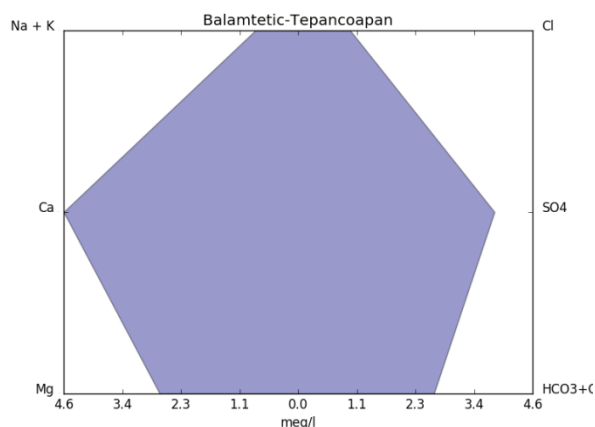


Figura 7.2. Diagrama de Stiff lago:
Balamtetic- Tepancoapan.

Fuente: Elaboración propia.

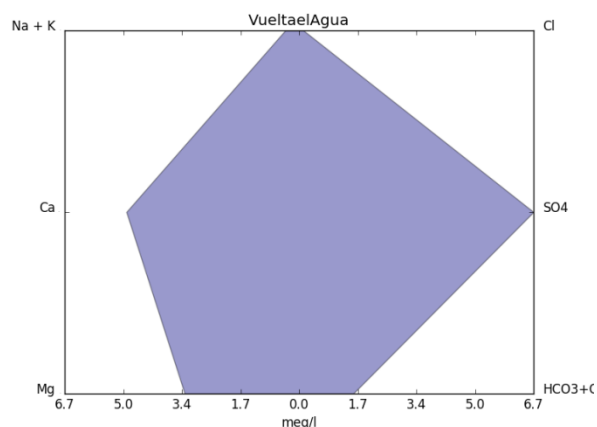


Figura 7.3. Diagrama de Stiff lago:
Vuelta el Agua

Fuente: Elaboración propia.

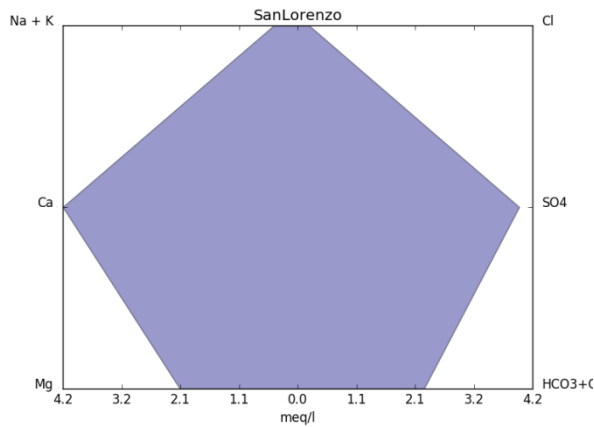


Figura 7.4. Diagrama de Stiff lago:
San Lorenzo

Fuente: Elaboración propia.

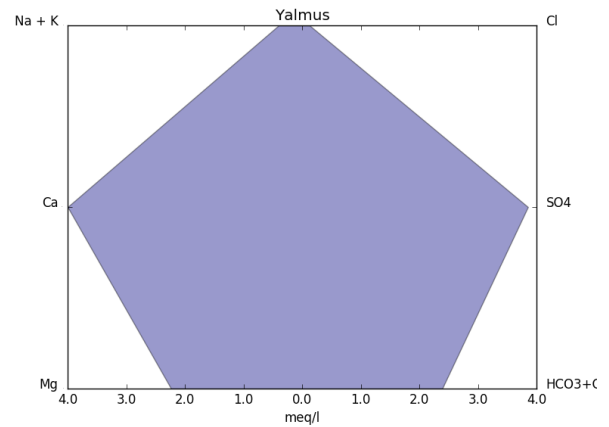


Figura 7.5. Diagrama de Stiff lago:
Yalmus

Fuente: Elaboración propia.

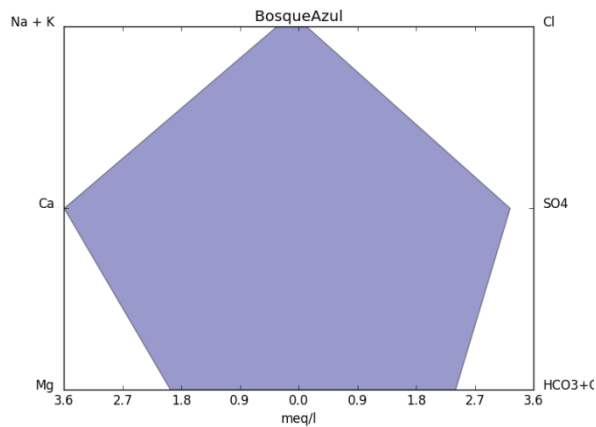


Figura 7.6. Diagrama de Stiff lago:
Bosque Azul

Fuente: Elaboración propia.

Y en la figura 7.7. se representa el diagrama de Piper y Hill, correspondiente a los cinco lagos que conforman este estudio, para así proceder al análisis gráfico de las composiciones mineralógicas de cada cuerpo de agua. La descripción de este tipo de diagramas se encuentra en el capítulo II, es importante considerar que este tipo de gráfico puede dar una mejor determinación de diferentes tipos de aguas en un solo gráfico, haciendo más sencillo el análisis.

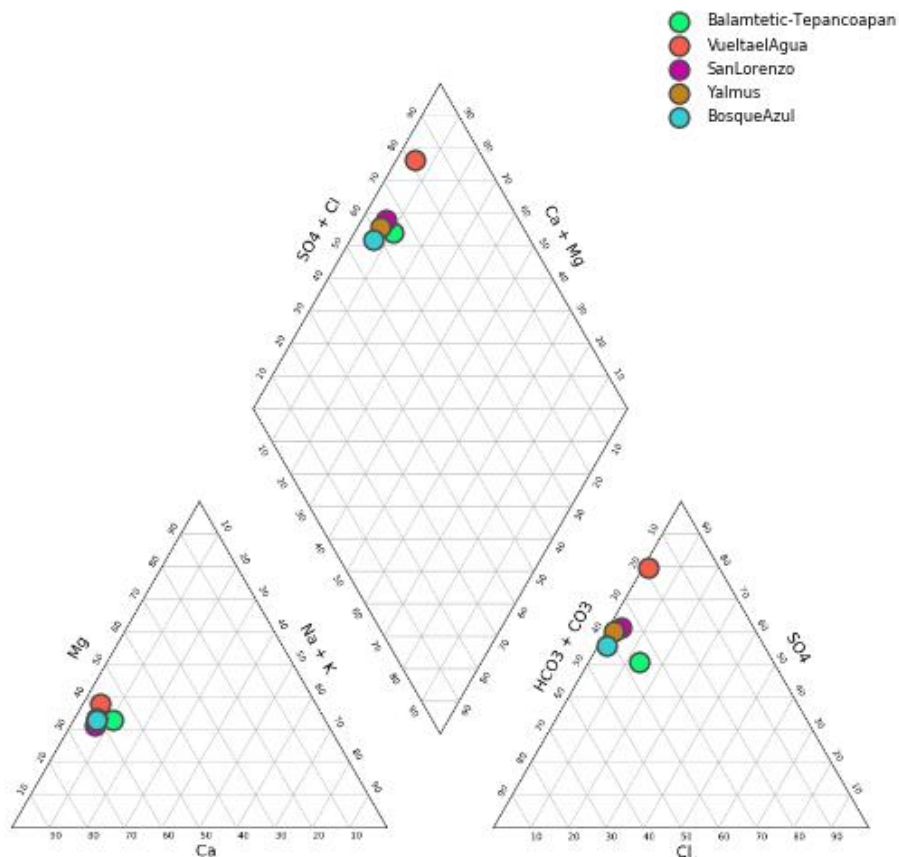


Figura 7.7. Diagrama de Piper y Hill comparativo.

Fuente: Elaboración propia.

De acuerdo a los diagramas de Stiff, los iones predominantes son el catión: calcio (Ca^{2+}) y el anión: sulfato (SO_4^{2-}), por lo que al observar el diagrama de Piper y Hill, se demuestra que las aguas son de tipo sulfatadas, cálcicas y/o magnésicas y bicarbonatadas, cálcicas y/o magnésicas. Esta clasificación, de acuerdo con la clasificación de Alekin y el conocimiento previo de la geología y condiciones climatológicas del sitio, indica que esta agua se encuentra en circulación por rocas sedimentarias, puede ser dulce o incluso tener sabor si circula por yesos o evaporitas, citando lo demostrado por el Sistema Geológico de los Estados Unidos (USGS) por sus siglas en inglés, las concentraciones aumentan a lo largo de las rutas de flujo y con efectos combinados como la disolución mineral y la evaporación, las concentraciones totales son los principales indicadores del grado de evolución química (USGS, 2017).

Calizas, yesos, margas, conglomerados, areniscas, evaporitas, dolomías, son algunas de las rocas que lixivia el agua de este tipo (Milán, 2015).

VII.IV. Modelación.

El proceso de modelación, se realizó siguiendo el ejemplo representado en el capítulo V, y tomando en cuenta los datos representados en la tabla 7.2., donde se encuentran los valores medios de cada parámetro necesario para alimentar la programación del modelo.

Los parámetros de cada solución fueron incluidos en el modelo en unidades de mg/l a excepción del pH y de acuerdo al flujo seguido por la conexión entre lagos, los modelos se hicieron en sentido inverso a la dirección de las corrientes, declarando como “solución 1” la solución inicial o (SI) y como “solución 2” la solución final o (SF), con la siguiente estructura:

- Modelo Inverso 1. Bosque Azul (SF) – Yalmus (SI).
- Modelo Inverso 2. Yalmus (SF) – San Lorenzo (SI).
- Modelo Inverso 3. San Lorenzo (SF) – Vuelta el Agua (SI).
- Modelo Inverso 4. Vuelta el Agua (SF) – Balamtetic-Tepancoapan (SI).

Considerando una evaluación de las siguientes –phases.

▪ Calcite	#CaCO ₃
▪ Dolomite	#CaMg(CO ₃) ₂
▪ Gypsum	#CaSO ₄ ·2H ₂ O
▪ Halite	#NaCl
▪ Magnesite	#MgCO ₃
▪ Sylvite	#KCl
▪ CO ₂ (g)	#Dioxido de carbono
▪ MgCl ₂ ·8H ₂ O	#Sal orgánica
▪ N ₂ (g)	#Notrógeno Molecular
▪ H ₂ S(g)	#Ácido Sulfhídrico
▪ CH ₂ O	#Materia Orgánica

Cada “phase” se determina por los índices de saturación y las concentraciones de cada ion, los cuales pueden ser producto de la disolución de rocas sedimentarias como la calcita, dolomita, yeso, halita, magnesita y silvita, por otra parte, aunque en sitio se encuentran todos estos tipos de rocas, como demuestra la geología descrita en el capítulo VI, no es posible satisfacer las condiciones de equilibrio en el modelo, por lo que las concentraciones de los iones y el tipo de agua puede deberse hipotéticamente a las descargas y escorrentías de agua con contenido de sales, ácido sulfhídrico y materia orgánica mezcladas en su composición. Así como la representación, de algunos fertilizantes nitrogenados, utilizados en las zonas agricultoras que pueden ser la causa del enriquecimiento de sulfato, nitrato, fosfato y otros iones contenidos en los cuerpos de agua de acuerdo con (Juárez Hernández, 2014).

Todos los modelos se pueden ver en el Anexo 1.

VII.V. Resultados de la modelación.

Los resultados de la modelación se concentran entre en la tabla 7.3. y la 7.7. (Excepto 7.4).

Para realizar cada uno de los modelos las soluciones se balancearon a partir del ion Cloruro Cl^- , ya que este es un ion conservador, que de acuerdo con lo descrito por: (Martínez, Bocanegra, & Manzano, 2000), puede emplearse para el cálculo de las proporciones de mezcla al evaporarse 1 lt. de agua y se utilizó un límite de incertidumbre en porcentaje, para permitir a la simulación satisfacer el balance molar para cada elemento y estado de valencia, y permitiendo al software resolver el modelo con precisión múltiple.

Tabla 7.3. Resultados de modelo inverso en lagos Bosque Azul – Yalmus.

Modelo Inverso 1. Bosque Azul - Yalmus				
Transferencias molares	Dato de entrada	Mínimo	Máximo	Forma Química
Yeso	-1.86E-04	-1.89E-04	-1.41E-04	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
Halita	-4.45E-05	-5.30E-05	-3.81E-05	NaCl
Magnesita	-1.29E-04	-1.50E-04	-1.04E-04	MgCO_3
Silvita	-5.89E-06	-8.16E-06	-3.62E-06	KCl
$\text{MgCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$	2.23E-05	1.58E-05	2.65E-05	$\text{MgCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
$\text{N}_2(\text{g})$	6.07E-07	5.92E-07	6.22E-07	N_2
$\text{H}_2\text{S}(\text{g})$	-1.30E-04	-1.63E-04	-1.15E-04	H_2S
CH_2O	2.59E-04	2.28E-04	3.24E-04	CH_2O

Reacciones Redox	
C(-4)	1.30E-04
N(0)	1.21E-06
S(-2)	-1.30E-04

Fuente: Elaboración propia.

Como se indica en el capítulo V, de los valores determinados por el método numérico, procesado por el software PHREEQC Versión 3A, los valores con valor positivo indicaran una disolución y los valores en valor negativo, indican una precipitación.

Para este primer modelo, determinado bajo una incertidumbre del 1.8 %, con un único resultado, se obtiene que durante el trayecto entre el lago Yalmus y Bosque Azul, los compuestos como, el yeso, halita, magnesita, silvita y sal, están presentes en forma saturada y en proceso de precipitación. En cambio, los compuestos de sal, nitrógeno y materia orgánica, se encuentran en un proceso de descomposición.

Además se presentan reacciones oxido-reductoras, como el proceso de Nitrificación, que hipotéticamente puede ser determinado por las concentraciones derivadas de los fertilizantes nitrogenados representados en la tabla 7.4.,

ocupados a los alrededores con el fin de obtener mayores beneficios de la agricultura (CICEANA, 2017).

Tabla 7.4. Fertilizantes utilizados en el sitio de estudio y regiones aledañas.

Nombre	Formula química
UREA	$(\text{NH}_2)_2\text{CO}$
DAP 18-46-0	$(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$
TRIPLE 17	$\text{N}, \text{P}_2\text{O}_5, \text{K}_2\text{O}$
18_12_06	18%N-12%P ₂ O ₅ -06%K ₂ O
Sulfato de amonio	$((\text{NH}_4)_2(\text{SO}_4))$
Sulfato de magnesio	MgSO_4
Sulfato de zinc	ZNSO_4
Sulfato de potasio	K_2SO_4
Nitrato de calcio	$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$
Nitrato de potasio	KNO_3
Foliar	N-K-P

Fuente: Olea, 2015.

También se presentan reacciones de oxidación de materia orgánica en la parte oxidante y una metano fermentación en la parte reductora, debido a que algunas bacterias utilizan el ion sulfato SO_4^{2-} , como agente oxidante para convertir la materia orgánica en hidratos de carbono.

Tabla 7.5. Resultados de modelo inverso en lagos Yalmus – San Lorenzo.

Modelo Inverso 2. Yalmus - San Lorenzo				
Transferencias molares	Dato de entrada	Mínimo	Máximo	Forma Química
Dolomita	-4.19E-05	-4.79E-05	-2.12E-05	$\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$
Yeso	-7.30E-05	-9.37E-05	-6.70E-05	$\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
Halita	-2.74E-05	-3.88E-05	-1.29E-05	NaCl
Magnesita	1.36E-04	9.40E-05	1.48E-04	MgCO_3
$\text{MgCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$	-2.50E-05	-3.57E-05	-2.01E-05	$\text{MgCl}_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
$\text{N}_2(\text{g})$	-4.14E-06	-4.23E-06	-4.05E-06	N_2
CH_2O	1.04E-05	1.01E-05	1.06E-05	CH_2O
Reacciones Redox				
C(-4)	5.18E-06			
N(0)	-8.29E-06			

Fuente: Elaboración propia.

En el modelo 2, determinado a una incertidumbre del 2.1% y con 2 modelos de solución encontrados para el alcance del equilibrio en el trayecto del lago San Lorenzo al lago Yalmus, los compuestos se comportan de la siguiente manera: La dolomita, yeso, halita, sal y nitrógeno, se encuentran en proceso de precipitación y los compuestos de magnesita y materia orgánica en proceso de disolución.

También presentan reacciones redox, aunque en este modelo resulta una desnitrificación por la reducción de los nitratos (CICEANA, 2017). Y la oxidación de materia orgánica (Milán, 2015).

Tabla 7.6. Resultados de modelo inverso en lagos San Lorenzo – Vuelta el Agua.

Modelo Inverso 3. San Lorenzo - Vuelta el Agua				
Transferencias molares	Dato de entrada	Mínimo	Máximo	Forma Química
Calcita	-4.05E-04	-4.71E-04	-3.18E-04	CaCO ₃
Halita	3.44E-05	1.72E-05	5.15E-05	NaCl
Magnesita	-5.95E-04	-6.72E-04	-5.49E-04	MgCO ₃
CO ₂ (g)	-1.20E-03	-1.33E-03	-9.40E-04	CO ₂
MgCl ₂ ·8H ₂ O	2.33E-05	1.07E-05	3.59E-05	MgCl ₂ ·8H ₂ O
N ₂ (g)	4.14E-06	4.03E-06	4.25E-06	N ₂
H ₂ S(g)	-1.40E-03	-1.43E-03	-1.27E-03	H ₂ S
CH ₂ O	2.78E-03	2.54E-03	2.84E-03	CH ₂ O
Reacciones Redox				
C(-4)	1.39E-03			
N(0)	8.29E-06			
S(-2)	-1.40E-03			

Fuente: Elaboración propia.

En el trayecto del lago Vuelta el Agua al lago San Lorenzo modelado con una incertidumbre del 2.5% y con dos modelos de solución, encontrado que, en ambos las condiciones de precipitación se dan para la calcita, magnesita, CO₂, y compuestos de ácido sulfhídrico, y el proceso de disolución para halita, sal, nitrógeno molecular y materia orgánica. Con la presencia de reacciones redox que indican una nitrificación, sulfato reducción y la oxidación de materia orgánica, debido principalmente a las concentraciones de ácido sulfhídrico producto de la acción bacteriana que se transforma a sulfato en cuanto se precipita (Milán, 2015).

Tabla 7.7. Resultados de modelo inverso en lagos Vuelta el Agua – Balamtetic-Tepancoapan.

Modelo Inverso 4. Vuelta el Agua - Balamtetic-Tepancoapan				
Transferencias molares	Dato de entrada	Mínimo	Máximo	Forma Química
Dolomita	5.77E-04	4.27E-04	7.16E-04	CaMg(CO ₃) ₂
Yeso	-2.68E-04	-6.33E-04	0.00E+00	CaSO ₄ ·2H ₂ O
Halita	-4.14E-04	-4.67E-04	-3.60E-04	NaCl
Silvita	-2.12E-05	-2.93E-05	-1.32E-05	KCl
CO ₂ (g)	1.54E-03	1.10E-03	2.18E-03	CO ₂
MgCl ₂ ·8H ₂ O	-2.21E-04	-2.80E-04	-1.62E-04	MgCl ₂ ·8H ₂ O
N ₂ (g)	-4.18E-06	-4.40E-06	-3.96E-06	N ₂
H ₂ S(g)	1.71E-03	1.43E-03	2.09E-03	H ₂ S
CH ₂ O	-3.41E-03	-4.16E-03	-2.85E-03	CH ₂ O

Reacciones Redox	
C(-4)	-1.71E-03
N(0)	-8.36E-06
S(-2)	1.71E-03

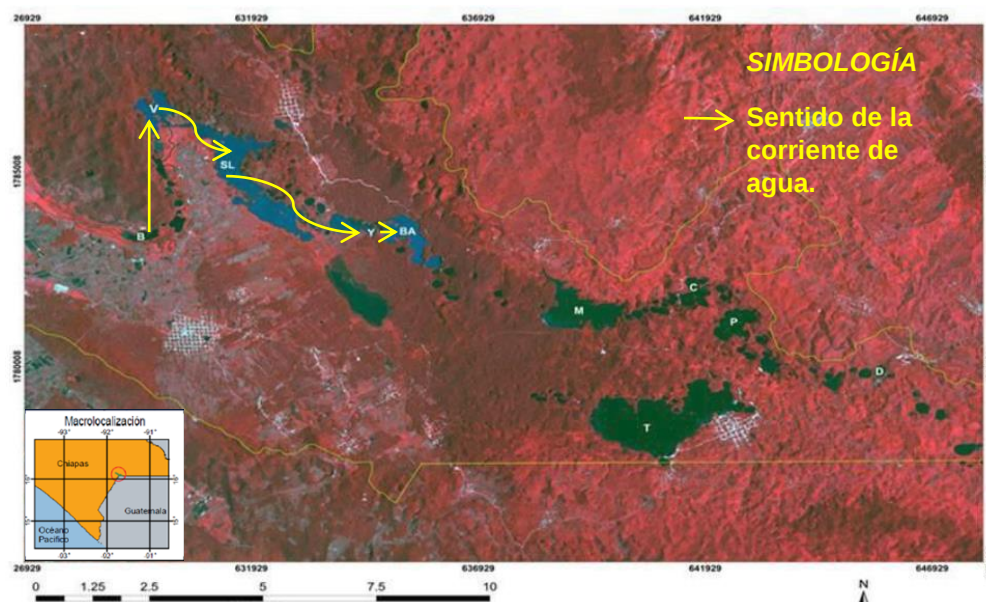
Fuente: Elaboración propia.

El modelo 4 da como resultado 3 posibles modelos de solución, obtenidos a una incertidumbre del 5%, el modelo seleccionado, muestra que los compuestos que están en proceso de disolución son las dolomitas, CO₂ y ácido sulfhídrico, mientras que en proceso de precipitación se encuentra yeso, halita, silvita, sal, nitrógeno molecular y materia orgánica. En tal sistema se indica una desnitrificación y una metano fermentación, debido a que la materia orgánica contenida se encuentra en un proceso de precipitación.

Debe aclararse que el modelo seleccionado no difiere en gran medida de los otros dos, los procesos de disolución y precipitación en los compuestos, así como las reacciones oxido-reducción tienen el mismo comportamiento con valores que no afectan en la interpretación de los resultados ya que no presentan desigualdades importantes.

VII.VI. Discusión de resultados.

Siguiendo el trayecto de los lagos del caso de estudio, el cual está compuesto de la siguiente manera: (ver figura 7.8.)



*Figura 7.8. Sentido de flujo en lagos afectados.
Fuente: (Mora Palomino et al., 2017)*

La descarga del río Grande, se da en primer lugar en el lago Balamtetic-Tepancopan, después sigue un trayectoria hacia el norte y se encuentra con el lago Vuelta el Agua, de ahí en dirección suroeste se encuentra con el cuerpo de agua conocido como lago San Lorenzo, y siguiendo la misma trayectoria descarga en el lago Yalmus, finalmente se conecta en dirección este con el lago Bosque Azul y se extiende por más cuerpos de agua de menor relevancia, hasta encontrarse con el desnivel que sirve como parte aguas para dividir los lagos afectados de los no afectados por las actividades antropogénicas.

Para comprender los resultados obtenidos de la modelación, los datos se analizaran del modelo inverso 4 al modelo inverso 1, considerando que todos los factores hidrogeológicos de los cuales fueron determinados estos resultados, están relacionados con la permeabilidad del acuífero, el tipo de flujo, su velocidad, así como la zona por donde se mueve el agua e inciden directamente en el tiempo de contacto entre el agua y el mineral (Fagundo & González, 2012; Appelo & Postma, 2010).

Del mismo modo la composición química puede variar por consecuencia de la actividad antropogénica, sobre el cual el agua ejerce un proceso de autodepuración, que tiene un impacto en la cantidad y tipo de las reacciones químicas del agua en contacto con el medio hidrogeológico (Milán, 2015; Fagundo & González, 2012; Appelo & Postma, 2010). Siendo importante considerar de acuerdo con (Martínez et. al., 2000), que aunque todas las muestras tomadas en una línea de flujo suelen corresponder a un mismo momento en el tiempo, las diferencias en las concentraciones pueden corresponder en parte a variaciones temporales en la recarga y no a reacciones con minerales, lo anterior indica que el agua pudo haber adquirido su composición mineralógica de distintos compuestos debido al arrastre generado por la temporada de lluvias en la región, debido a que el mes de agosto se encuentra por estadística dentro de esta temporada.

Entre los principales impactos generados por la actividad antropogénica, se presentan:

1. La disminución de los niveles naturales de oxígeno disuelto y aumento de materia orgánica biodegradable.
2. Eutroficación en lagos y embalses con producción de mal olor.
3. Aumento de la población microbiológica patógena, que da lugar a la aparición de enfermedades de origen hídrico.
4. Incremento de sólidos orgánicos suspendidos y sedimentables en corrientes superficiales.
5. Aumento del contenido de sales disueltas provocado por aportes salinos de aguas residuales industriales.

El modelo inverso 4, de acuerdo con (Jeelani et al., 2011), es el principal indicador de que el primer cuerpo de agua en que se presenta la descarga de una corriente, por las condiciones de relieve del sitio y su geología, puede acumular importantes

cantidades de compuestos minerales y otros componentes en forma saturada que están en proceso de precipitación, como es el caso de las principales rocas sedimentarias del medio geológico, que a su vez, son los minerales que pueden ser solubilizados con mayor facilidad (Fagundo & Gonzáles, 2012).

La alta solubilización, se debe principalmente a que geológicamente esta área del sistema lagunar está envuelta en un sistema kárstico compuesto de rocas calizas, dolomitas y gracias al flujo tanto superficial como subterráneo, acarrea compuestos en solución o en proceso de precipitación como el yeso y lutita de los sistemas geológicos colindantes y al haber tomado las muestras en temporada de lluvias, aumenta la probabilidad de tener un total de sólidos disueltos (TDS) mayor que en temporada de estiaje siendo necesario realizar un muestreo en esta época para su comparación. (Cabrera, A. & M. Blarasin, 2000)

También se encuentran compuestos como la materia orgánica, que aún en proceso de precipitación, puede presentarse en descomposición y ser la causa de las emisiones de CO_2 (g) emitidas a la atmósfera, así como del proceso de oxidación que da lugar a la formación de metano CH_4 , que al no ser soluble en el agua escapa también a la atmósfera (Milán, 2015; Fagundo & Gonzáles, 2012; Appelo & Postma, 2010).

El proceso de desnitrificación en entre estos cuerpos de agua, ocurre debido a que las bacterias desnitrificadoras, revierten la acción de las fijadoras de nitrógeno, regresándolo a la atmósfera en forma gaseosa, propiciando una pérdida de nitrógeno en el ecosistema y ocurre principalmente donde existe un exceso de materia orgánica y las condiciones son anaerobias, con un alto pH y hay presencia de escurrimientos de los fertilizantes al suelo como lo explica (CICEANA, 2017).

La circulación del flujo por dos cuerpos de agua, antes de llegar al lago San Lorenzo, da como resultado cambios en los procesos de disolución y precipitación de los compuestos, por lo que en el modelo inverso 3, se presentan en proceso de precipitación, carbonatos de calcio (Ca^{2+}) y magnesio (Mg^{2+}) y en disolución compuestos con contenido de sodio (Na^+), cumpliendo con el primer índice hidrogeoquímico que indica que si la relación entre (Na^+/Cl^-), es alrededor de 1.9, se trata de un agua superficial donde el calcio aumenta por la disminución del sodio y da paso a la formación de carbonatos (Milán, 2015; Fagundo & Gonzáles, 2012; Appelo & Postma, 2010).

La materia orgánica se encuentra en proceso de transformación, y las concentraciones de sulfatos se encuentran en proceso de precipitación sirviendo como agente oxidante de materia orgánica hasta convertirla en dióxido de carbono (CO_2) (Milán, 2015). Y se presenta una nitrificación, donde, catalizados por microorganismos y amoníaco los compuestos de nitrógeno se oxidan a nitrato (Milán, 2015; Fagundo & Gonzáles, 2012; Appelo & Postma, 2010).

Este proceso se debe en mayor parte a que el flujo superficial se mueve por un caudal más estrecho y de acuerdo con (Belkhiri et.al., 2010), este comportamiento

está determinado por la relación ($\text{Ca/Mg}=1$), que para el lago San Lorenzo da una relación de 2.98, lo que indica una contribución alta de calcita, que puede llegar al proceso de precipitación como se comprueba en el resultado de la modelación.

En el modelo inverso 2, los principales compuestos minerales, como: dolomita, yeso y halita, se encuentran en forma precipitada, lo cual demuestra que el agua donde se contiene, se clasifica como agresiva, esto también determinado por el alto nivel de pH, que alcanza hasta valores de 9.07 en el trayecto. Esto indica que la exposición de estas rocas tiene una gran superficie expuesta al ataque del agua, por lo que se producirá más rápido un proceso de disolución, deteniéndose dicho proceso al alcanzar el agua la condición de saturación (Fagundo & Gonzáles, 2012).

La materia orgánica es transportada en menos concentraciones y por tal se conserva en un proceso de disolución, aportando nitrógeno al oxidarse y por medio de la desnitrificación, regresa a la atmósfera en forma gaseosa (CICEANA, 2017).

Por último el modelo inverso 1, que abarca los últimos dos lagos de la zona de estudio, siguiendo el sentido del flujo, da como resultado procesos de sulfato reducción y metano fermentación a causa de la disolución de la materia orgánica contenida en el trayecto y transferencias molares que indican un agua de tipo superficial altamente agresiva en donde se precipitan la mayoría de los compuestos minerales provenientes de la disolución de rocas presentes en la geología regional y que actualmente se encuentran en proceso de precipitación (Milán, 2015; Fagundo & Gonzáles, 2012; Appelo & Postma, 2010).

Este proceso ocurre en mayor medida debido a que las velocidades del flujo en el transecto se han reducido considerablemente, dando paso a las reacciones redox con mayor intensidad y produciendo la oxidación del nitrito en nitrato, proceso conocido como nitrificación, que a su vez entrega energía a las bacterias las cuales se encargan de la descomposición de la materia orgánica, ocasionando una liberación de metano a la atmósfera de mayor magnitud que en los modelos anteriores (Milán, 2015; Fagundo & Gonzáles, 2012; Appelo & Postma, 2010; CICEANA, 2017).

En este último lago del sitio de estudio, la concentración de Cl^- , ha disminuido significativamente, iniciando con una media de 35.30 mg/l en el lago Balamtetic-Tepancoapan, a una concentración de 4.25 mg/l en lago Bosque Azul, que de acuerdo con (Rodríguez, et al., 2002), las altas concentraciones de este ion, son resultado de efluentes industriales, urbanos y rurales. Indicando el descenso de este ion el efecto de autodepuración del agua a través del flujo.

Capítulo VII. Conclusiones y recomendaciones.

Los procesos hidrogeoquímicos en el Sistema Lagunar Montebello, se identificaron mediante la modelación inversa en PHREEQC, encontrando que los principales procesos determinados por el software y comprobados por la comparación con el sitio y fuentes bibliográficas, son predominantemente, la precipitación de yesos, debido en gran parte a la baja solubilidad de este mineral y por otra parte la variación entre procesos de disolución y precipitación de las diferentes rocas que predominan en el medio geológico del sitio. Además de las reacciones redox debidas principalmente a la presencia de materia orgánica, elementos nitrogenados y sales, que aunque no son parte de la geología llegan a los cuerpos de agua por medio de descargas y escorrentías.

La modelación hidrogeoquímica, se investigó en medios impresos y digitales, incluyendo los procesos edafológicos e hidrogeológicos, tomando como referencia reportes y artículos nacionales e internacionales de casos de estudios similares, de los cuales se encontró una vasta bibliografía con ejemplos y manuales para el correcto proceso y aplicación de los datos en el modelado hidrogeoquímico.

El proceso de modelación, se ejemplificó con la utilización del software PHREEQC, tomando como referencia el manual del programa.

La información de la región determinada Sistema Lagunar Montebello, Chiapas, se recabó, con el objetivo de conocer cada una de las características del sitio de estudio, para el correcto análisis del área a partir del reconocimiento del marco geológico, la geomorfología predominante, geografía, clima, flora y fauna. Que en conjunto con las condiciones socio-ambientales determinan el grado de impacto ambiental en la región de estudio.

En el caso de estudio seleccionado, se realizó la modelación hidrogeoquímica inversa mediante el software PHREEQC, tomando como base los datos recabados mediante el muestreo realizado el mes de agosto de 2014 por el Instituto de Geología de la UNAM, en cada uno de los lagos al cual se le aplicó un análisis estadístico.

De esta actividad, se concluye que el modelado inverso es de utilidad para determinar los procesos hidrogeoquímicos con base en las ecuaciones de balance de masa, la presencia de tales reacciones y la posible predicción de la composición mineralógica. Y que esta herramienta aporta al modelador, información de importancia para conocer datos relevantes del sitio, como la calidad del agua al estar expuesta a procesos naturales y a las perturbaciones del sistema.

Las condiciones del sitio, tales como las condiciones físicas y la temporada del año en que se recaban los datos para la alimentación del modelo, son factores importantes, debido a que la redistribución de los elementos y compuestos químicos a lo largo del cauce que conecta a los diferentes lagos, así como el

tamaño y la ubicación de cada uno de estos, influyen directamente en la modelación y propician que los procesos hidroggeoquímicos predominantes presenten variaciones.

Se recomienda seguir este proceso, para la interpretación del origen y funcionamiento de los sistemas hidroggeoquímicos, el conocimiento más cercano en cuanto a su comportamiento y la posible línea de investigación para el saneamiento de áreas afectadas por la actividad humana, donde la característica de autodepuración del agua ha perdido efecto y ha ocasionado el cambio en la tonalidad del agua y la presencia de reacciones redox, propias de la reducción de oxígeno disuelto debido a la descomposición de materia orgánica.

También se recomienda la realización de este proceso con una base de datos, basada en muestreos realizados al final de la temporada de estiaje, a fin de comparar los procesos hidroggeoquímicos predominantes, e identificar las posibles similitudes o diferencias entre los ocurridos en temporada de lluvias.

Referencias.

- Addinsoft. (26 de Diciembre de 2017). *XLSTAT*. Obtenido de XLSTAT: <https://www.xlstat.com/es/>
- Almazán, F. (2017). *Identificación de atrazina en muestras de agua superficial mediante HPLC*. Ciudad de México: UNAM.
- Appelo, C., & Postma, D. (2005). *Geochemistry, groundwater and pollution*. Amsterdam: The Netherlands.
- Appelo, C., & Postma, D. (2010). *Geochemistry, groundwater and pollution*. Great Britain: A.A. Balkema Publishers, Leiden, The Netherlands & Francis Group.
- Belkhir, L., Boudoukha, A., Mouni, L., & Baouz, T. (2010). Application of multivariate statistical methods and inverse geochemical modeling for characterization of ground water - A case study: Ain Azel plain (Algeria). *Geoderma*, 390-398.
- Bello, K. (2016). *Determinación del plaguicida Paraquat en muestras tomadas de las Lagunas de Montebello, Chiapas*. Ciudad de México: UNAM.
- Cabrera, A., & M. Blarasin. (2000). *Hidrogeoquímica y análisis multivariado en el acuífero freático de una cuenca de llanura al sur de Córdoba, Argentina*. Córdoba, Argentina.: Dpto. de Geología. Universidad Nacional de Río Cuarto.
- CICEANA. (27 de 12 de 2017). *Divulgación de las Ciencias Genómicas*. Obtenido de Divulgación de las Ciencias Genómicas: http://www.divulgacion.ccg.unam.mx/webfm_send/109
- CONAGUA. (2009). *Plan de Gestión de la Cuenca del Río Grande - Lagunas de Montebello Chiapas - México*. Chiapas, México: Comisión Nacional del Agua.
- Custodio, E., & Llamas, M. (2001). *Hidrología subterránea* (Segunda edición ed.). Barcelona: Ediciones Omega S.A.
- D. Hem, J. (1985). *Study an Interpretation of Chemical Characteristics of natural Water*. Alexandria: U.S. Geological Survey.
- Durán, I. C., Escolero, O. F., Muñoz, E. S., Castillo, M. R., & Silva, G. R. (2014). Cartografía geomorfológica a escala 1:50000 del Parque Nacional Lagunas de Montebello, Chiapas (México). *Sociedad Geológica Mexicana A.C.*, 263-277.

- Fagundo, J. C., & González, P. (2016). *Hidrogeoquímica Química del Agua Subterranea*. Alemania: Editorial Académica Española.
- Figueredo-Rodríguez, H., & Lara Hernandez, A. (2012). *ESTUDIO PARA CONOCER LA CALIDAD DEL AGUA DEL PARQUE NACIONAL LAGUNAS DE MONTEBELLO*. Comitán, Chiapas: GEIC.
- Galicia-Luna, V. J. (2012). *Lagunas de Montebello: Las Atonalidades de una Problemática Tonal*. Morelia, Michoacán : Universidad Nacional Autónoma de México.
- Gary, D. (2009). *Química Analítica*. México: Mc. Graw Hill.
- Gidahatari. (06 de Octubre de 2017). *gidahatari.com*. Obtenido de <https://static1.squarespace.com/static/521e95f4e4b01c5870ce81cf>
- González de Vallejo, L., Ferrer, M., Ortuño, L., & Oteo, C. (2002). *Ingeniería Geológica*. Madrid: Prentice Hall.
- I.G.M.E. (1985). *Calidad y contaminación de las aguas subterráneas en España*. España: IGME.
- Jeelani, G., A. Bath, N., Shivanna, K., & Y. Bath, M. (2011). Geochemical characterization of surface water and spring water in SE Kashmir Valey, western Himalaya: Implications to water-rock interaction. *Indian Academy of Sciences*, 921 - 932.
- Juárez-Hernández, E. L. (2014). *Análisis hidrogeoquímico de la cuenca del río grande Comitán*. Ciudad Universitaria, D.F.: Facultad de Ingeniería.
- Juarez, E. B., & Rico, A. R. (1969). *Mecánica de suelos I*. México.
- L. Parkhurst, D., & Appelo, C. (2013). Description of Input and Examples for PHREEQC Version 3—A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations. En U. G. Survey, *U.S. Geological Survey Techniques and Methods* (pág. 497). Colorado: U.S.G.S.
- López-Ramos, E. (1981). *Geología General*. México: Instituto de Geología, UNAM.
- Marín, R. G. (2005). *Características físicas, químicas y biológicas de las aguas*. Córdoba: Empresa Municipal de Aguas de Córdoba (EMACSA).
- Martínez, D., Bocanegra, E., & Manzano, M. (2000). La modelación hidrogeoquímica como herramienta en estudios hidrogeológicos. *Boletín geológico y minero*, 83-97.
- Martínez, M. A. (2015). *Caracterización de los Suelos de la cuenca del río Grande, como soporte para entender la dinámica de contaminantes que llegan al sistema lagunar de Montebello, Chiapas*. México D.F.: Universidad Nacional Autónoma de México.

- Milán, S. V. (2015). *Principios de Hidrogeoquímica*. México: Aqua Ediciones.
- Monsalve, G. S. (1999). *Hidrología en la Ingeniería*. Colombia: Impreandes Presencia S.A.
- Mora-Palomino, L., García, L., Ramos, Y., Bonifaz, R., & Escolero, O. (2017). Description of chemical changes in a large karstic system: Montebello, Mexico. *EL SEVIER*, 829-832.
- Morán-Ramírez, J., Ramos-Leal, J., López-Álvarez, B., Carranco, S. L., & Santacruz-De León, G. (2013). Comportamiento hidrogeoquímico de flujos subterráneos en acuíferos cársticos fracturados, aplicando modelación inversa: Caso husateca Potosina. *Boletín de la Sociedad Geológica Mexicana*, 71-82.
- NOM-230. (2002). *NORMA Oficial Mexicana NOM-230-SSA1-2002, Salud ambiental. Agua para uso y consumo humano, requisitos sanitarios que se deben cumplir en los sistemas de abastecimiento públicos y privados durante el manejo del agua. Procedimientos sanitarios para el muest.* México: Secretaría de Salud.
- Olea, S. (2015). *Análisis del impacto de la actividad agrícola en el agua subterránea en la zona de la Trinitaria, Chiapas*. México, D.F.: UNAM.
- OMS. (2003). *GUIDELINES FOR DRINKING-WATER QUALITY*. Suiza: World Health Organization.
- OMS. (2011). *Manganese in Drinking-water*. Suiza: World Health Organization.
- P. Higuera, & R. Oyarzun. (26 de 07 de 2017). https://previa.uclm.es/users/higuera/mga/Tema02/Hidrosfera_contaminantes_0.htm#InicioT2. Obtenido de https://previa.uclm.es/users/higuera/mga/Tema02/Hidrosfera_contaminantes_0.htm#InicioT2: https://previa.uclm.es/users/higuera/mga/Tema02/Hidrosfera_contaminantes_0.htm#InicioT2
- Reyes, J. S. (2017). *Propuesta de un Modelo Hidrogeoquímico para el Sistema Lagunar Montebello, Chiapas*. Ciudad de México: Facultad de Química, UNAM.
- Rodríguez, M., Granero, M., Bustamante, M., Avena, M., Bonfanti, E., Busso, F., & Girbal, A. (2002). *Análisis de la composición iónica de las aguas del embalse de San Roque, Córdoba*. Córdoba, Argentina.: Instituto Nacional del Agua.
- Rojas-Romero, J. A. (1996). *ACUIQUÍMICA*. Santafé de Bogotá: Escuela Colombiana de Ingeniería.
- Salminen, R. (2005). *Geochemical Atlas of Europe*. Belgium: Rue du Luxembourg.

- Sánchez, F. S. (2012). *Procesos químicos en el agua*. Salamanca: Dpto Geología Univ. Salamanca.
- SEMARNAT. (2007). *Programa de Conservación y Manejo Parque Nacional Lagunas de Montebello*. México: Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales.
- Sheikhy, T., Firuz, M., Zaharin, A., Azmin, W., Juahir, H., & Fakharian, K. (2014). Identification of the Hydrogeochemical Processes in Groundwater Using Classic Integrated Geochemical Methods and Geostatistical Techniques, in Amol-Babol Plain, Iran. *The Scientific World Journal*, 1-15.
- Sposito, G. (1989). *The Chemistry of Soils*. New York: Oxford University Press.
- USGS. (1962). Chemistry of Iron in Natural Water. *GEOLOGICAL SURVEY* , 1-30.
- USGS. (10 de 05 de 2017). *USGS*. Recuperado el 10 de 05 de 2017, de United States Geological Survey: <http://www.cusiglas.com/significadode/usgs.php>
- Zapata, R. H. (2006). *Química de los procesos Pedogenéticos*. Medellín: Universidad Nacional de Colombia.
- Zárate, A. (10 de 2015). Montebello, Chiapas: el gris panomrama de las lagunas. *La Jornada*.
- Zayago, C. (Compositor). (2015). Curso de modelamiento Hidrogeoquímico con PHREEQC. [C. Zayago, Intérprete] España.

Anexo 1. Modelos hidrogeoquímicos inversos.

```

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIBAZ-YAL.phr
miércoles, 17 de enero de 2018 12:03 a.m.

TITLE Modelación Bosque Azul - Yalmus
PRINT; -reset false; inverse true
SOLUTION 1
-units mg/l
  pH      8.990
  N(+5) 0.003 as N
  Na      7.630
  K       2.580
  Ca      79.79
  Mg      26.75
  Alkalinity 145.49 as HCO3
  Cl      4.45
  S(6) 184.53 as SO4

SOLUTION 2
-units mg/l
  pH      8.77
  N(+5) 0.020 as N
  Na      6.50
  K       2.35
  Ca      72.19
  Mg      23.69
  Alkalinity 146.90 as HCO3
  Cl      4.25
  S(6) 155.89 as SO4

INVERSE_MODELING 1
-solutions 1 2
-uncertainty 0.018
-range
-phases
  Calcite          dissolv
  Dolomite         dissolv
  Gypsum           precip
  Halite           precip
  Magnesite        precip
  Sylvite          precip
  CO2(g)           precip
  MgCl2:6H2O
  N2(g)
  H2S(g)
  CH2O             dissolv
-balances
  Na
  Cl
  K
  S(6)

PHASES
CH2O
  CH2O = 0.5CO2 + 0.5CH4
log_k 0
H2S(g)

```

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIBAZ-YAL.phr

miércoles, 17 de enero de 2018 12:03 a.m.

```

H2S = H+ + HS-
-log_k -7.9759
-analytic -97.354 -3.1576e-2 1.8285e3 37.44 28.56
MgCl2:8H2O
MgCl2:8H2O = Mg+2 + 2Cl- + 8H2O
-analytic 989.331411 0.28201417 -27059.8088 -395.438891 0 0
Vm 159.08
CO2(g)
CO2 = CO2
-log_k -1.468
-delta_h -4.776 kcal
-analytic 10.5624 -2.3547e-2 -3972.8 0 5.8746e5 1.9194e-5
-T_c 304.2 # critical T, K
-P_c 72.86 # critical P, atm
-Omega 0.225 # acentric factor
N2(g)
N2 = N2
-log_k -3.1864
-analytic -58.453 1.818e-3 3199 17.909 -27460
-T_c 126.2
-P_c 33.50
-Omega 0.039
Sylvite
KCl = K+ + Cl-
log_k 0.900
-delta_h 8.5
-analytic 3.984 0.0 -919.55
Vm 37.5
Magnesite
MgCO3 = CO3-2 + Mg+2
log_k -7.834
delta_h -6.169
Vm 28.3
END

```

```

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIBAZ-YAL.phr.out                                     miércoles, 27 de diciembre de 2017 05:03 p.m.
Using PHREEQC: version 3.2.2, compiled on August 27, 2015
  Input file: BAZ-YAL.phr
  Output file: BAZ-YAL.phr.out
  Database file: c:\phreeqc\database\phreeqc.dat

-----
Reading data base.
-----

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

-----
Reading input data for simulation 1.
-----

TITLE Modelación Bosque Azul - Valmus
PRINT
  reset false
Using C11 standard precision optimization routine.

Solution 1:

      Input      Delta      Input+Delta
pH      8.990e+00 + 0.000e+00 = 8.990e+00
Alkalinity 2.385e-03 + 4.294e-05 = 2.428e-03
C(-4) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
C(4) 2.089e-03 + 0.000e+00 = 2.089e-03
Ca 1.992e-03 + -3.585e-05 = 1.956e-03
Cl 1.256e-04 + 0.000e+00 = 1.256e-04
H(0) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
K 6.601e-05 + 0.000e+00 = 6.601e-05
Mg 1.101e-03 + -1.981e-05 = 1.081e-03
N(0) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
N(3) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
N(5) 2.143e-07 + 0.000e+00 = 2.143e-07
Na 3.320e-04 + -4.736e-06 = 3.273e-04
O(0) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
S(-2) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
S(6) 1.922e-03 + 3.459e-05 = 1.956e-03

Solution 2:

      Input      Delta      Input+Delta
pH      8.770e+00 + 0.000e+00 = 8.770e+00
Alkalinity 2.408e-03 + 2.258e-05 = 2.431e-03
C(-4) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00

```

F:\ITESIS 1UNIV. TRANSECTO CIBAZ-YAL.phr.out

miércoles, 27 de diciembre de 2017 05:03 p.m.

C(4)	2.220e-03	+	0.000e+00	=	2.220e-03
Ca	1.802e-03	+	-3.243e-05	=	1.769e-03
Cl	1.199e-04	+	0.000e+00	=	1.199e-04
H(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.012e-05	+	0.000e+00	=	6.012e-05
Mg	9.748e-04	+	0.000e+00	=	9.748e-04
N(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(5)	1.428e-06	+	0.000e+00	=	1.428e-06
Na	2.829e-04	+	0.000e+00	=	2.829e-04
O(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(6)	1.623e-03	+	1.613e-05	=	1.640e-03

Solution fractions:		Minimum	Maximum
Solution	1	1.000e+00	1.000e+00
Solution	2	1.000e+00	1.000e+00

Phase mole transfers:		Minimum	Maximum	
Gypsum	-1.864e-04	-1.887e-04	-1.412e-04	CaSO4:2H2O
Halite	-4.445e-05	-5.299e-05	-3.812e-05	NaCl
Magnesite	-1.285e-04	-1.502e-04	-1.044e-04	MgCO3
Sylvite	-5.887e-06	-8.158e-06	-3.617e-06	KCl
MgCl2:8H2O	2.234e-05	1.583e-05	2.651e-05	MgCl2:8H2O
N2(g)	6.071e-07	5.923e-07	6.219e-07	N2
H2S(g)	-1.304e-04	-1.625e-04	-1.150e-04	H2S
CH2O	2.593e-04	2.284e-04	3.235e-04	CH2O

Redox mole transfers:

C(-4)	1.297e-04
N(0)	1.214e-06
S(-2)	-1.304e-04

Sum of residuals (epsilons in documentation): 6.865e+00
Sum of delta/uncertainty limit: 6.865e+00
Maximum fractional error in element concentration: 1.800e-02

Model contains minimum number of phases.

=====

Summary of inverse modeling:

Number of models found: 1
Number of minimal models found: 1
Number of infeasible sets of phases saved: 17
Number of calls to cll: 45

End of Run after 0.704 Seconds.

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIYAL-SAL.phr

miércoles, 17 de enero de 2018 12:25 a.m.

TITLE Modelación Inversa Yalmus - San Lorenzo

PRINT; -reset false; inverse true

SOLUTION 1

```

-units mg/l
pH      9.07
Na       8.26
N(+5) 0.119 as N
K        2.66
Ca      84.49
Mg      25.44
Alkalinity 138.81 as HCO3
Cl       7.19
S(6) 191.39 as SO4

```

SOLUTION 2

```

-units mg/l
pH      8.99
Na       7.63
N(+5) 0.003 as N
K        2.58
Ca      79.79
Mg      26.75
Alkalinity 145.49 as HCO3
Cl       4.45
S(6) 184.53 as SO4

```

INVERSE_MODELING 1

```

-solutions 1 2
-uncertainty 0.021
-range
-phases

```

Calcite	Dissolv	#CaCO3
Dolomite	Precip	#CaMg
Gypsum	Precip	#CaSO4·2H2O
Halite	Precip	#NaCl
Magnesite	Dissolv	#MgCO3
Sylvite	Dissolv	#KCl
CO2(g)	Precip	
MgCl2·6H2O	Precip	
N2(g)	Precip	
H2S(g)	Dissolv	
CH2O	Dissolv	

-balances

```

Na
Cl
K
S(6)

```

PHASES

CH2O

CH2O = 0.5CO2 + 0.5CH4

log_k 0

H2S(g)

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIYAL-SAL.phr

miércoles, 17 de enero de 2018 12:25 a.m.

```

H2S = H+ + HS-
-log_k -7.9759
-analytic -97.354 -3.1576e-2 1.8285e3 37.44 28.56
MgCl2:6H2O
MgCl2:6H2O = Mg+2 + 2Cl- + 6H2O
-analytic 989.331411 0.28201417 -27059.8088 -395.438891 0 0
Vm 159.08
CO2(g)
CO2 = CO2
-log_k -1.468
-delta_h -4.776 kcal
-analytic 10.5624 -2.3547e-2 -3972.8 0 5.8746e5 1.9194e-5
-T_c 304.2 # critical T, K
-P_c 72.86 # critical P, atm
-Omega 0.225 # acentric factor
N2(g)
N2 = N2
-log_k -3.1864
-analytic -58.453 1.818e-3 3199 17.909 -27460
-T_c 126.2
-P_c 33.50
-Omega 0.039
Sylvite
KCl = K+ + Cl-
log_k 0.900
-delta_h 8.5
-analytic 3.984 0.0 -919.55
Vm 37.5
Magnesite
MgCO3 = CO3-2 + Mg+2
log_k -7.834
delta_h -6.169
Vm 28.3
END

```

```

F:\TESIS UNIV. TRANSECTO CIYAL-SAL.phr.out
miércoles, 17 de enero de 2018 12:28 a.m.

Using PHREEQC: version 3.2.2, compiled on August 27, 2015
  Input file: YAL-SAL.phr
  Output file: YAL-SAL.phr.out
  Database file: c:\phreeqc\database\phreeqc.dat

-----
Reading data base.
-----

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

-----
Reading input data for simulation 1.
-----

TITLE Modelación Inversa Yalmus - San Lorenzo
PRINT
  reset false
Using C11 standard precision optimization routine.

Solution 1:

      Input      Delta      Input+Delta
pH      9.070e+00 + 0.000e+00 = 9.070e+00
Alkalinity 2.276e-03 + 4.779e-05 = 2.324e-03
C(-4)    0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
C(4)     1.947e-03 + 3.655e-05 = 1.983e-03
Ca       2.109e-03 + -4.429e-05 = 2.065e-03
Cl       2.029e-04 + 0.000e+00 = 2.029e-04
H(0)     0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
K        6.806e-05 + -1.429e-06 = 6.663e-05
Mg       1.047e-03 + -2.198e-05 = 1.025e-03
N(0)     0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
N(3)     0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
N(5)     8.500e-06 + 0.000e+00 = 8.500e-06
Na       3.595e-04 + -1.808e-08 = 3.594e-04
O(0)     0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
S(-2)    0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
S(6)     1.993e-03 + 4.186e-05 = 2.035e-03

Solution 2:

      Input      Delta      Input+Delta
pH      8.990e+00 + 0.000e+00 = 8.990e+00
Alkalinity 2.385e-03 + 5.009e-05 = 2.436e-03
C(-4)    0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00

```

-1-

F:\ITESIS 1UNIV. TRANSECTO CIYAL-SAL.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:28 a.m.

C (4)	2.089e-03	+	-4.388e-05	=	2.046e-03
Ca	1.992e-03	+	-4.183e-05	=	1.950e-03
Cl	1.256e-04	+	0.000e+00	=	1.256e-04
H (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.601e-05	+	6.185e-07	=	6.663e-05
Mg	1.101e-03	+	-7.173e-06	=	1.094e-03
N (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N (3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N (5)	2.143e-07	+	0.000e+00	=	2.143e-07
Na	3.320e-04	+	0.000e+00	=	3.320e-04
O (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S (-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S (6)	1.922e-03	+	4.036e-05	=	1.962e-03

Solution fractions:

		Minimum	Maximum	
Solution	1	1.000e+00	1.000e+00	1.000e+00
Solution	2	1.000e+00	1.000e+00	1.000e+00

Phase mole transfers:

		Minimum	Maximum	
Dolomite	-4.191e-05	-4.790e-05	-2.116e-05	CaMg (CO3) 2
Gypsum	-7.297e-05	-9.372e-05	-6.699e-05	CaSO4:2H2O
Halite	-2.740e-05	-3.881e-05	-1.290e-05	NaCl
Magnesite	1.356e-04	9.399e-05	1.475e-04	MgCO3
MgCl2:8H2O	-2.496e-05	-3.566e-05	-2.007e-05	MgCl2:8H2O
N2(g)	-4.143e-06	-4.234e-06	-4.051e-06	N2
CH2O	1.036e-05	1.013e-05	1.059e-05	CH2O

Redox mole transfers:

C (-4)	5.179e-06
N (0)	-8.286e-06

Sum of residuals (epsilons in documentation): 1.065e+01

Sum of delta/uncertainty limit: 1.065e+01

Maximum fractional error in element concentration: 2.100e-02

Model contains minimum number of phases.

=====

Solution 1:

	Input		Delta		Input+Delta
pH	9.070e+00	+	0.000e+00	=	9.070e+00
Alkalinity	2.276e-03	+	4.610e-05	=	2.322e-03
C (-4)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
C (4)	1.947e-03	+	4.089e-05	=	1.988e-03
Ca	2.109e-03	+	-4.429e-05	=	2.065e-03
Cl	2.029e-04	+	0.000e+00	=	2.029e-04
H (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.806e-05	+	-1.429e-06	=	6.663e-05
Mg	1.047e-03	+	-2.198e-05	=	1.025e-03
N (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N (3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00

-2-

F:\TESIS IUNV. TRANSECTO CIYAL-SAL.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:28 a.m.

```

N(5)      8.500e-06 + 0.000e+00 = 8.500e-06
Na        3.595e-04 + -1.710e-06 = 3.577e-04
O(0)      0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
S(-2)     0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
S(6)      1.993e-03 + 4.186e-05 = 2.035e-03

```

Solution 2:

	Input	Delta	Input+Delta
pH	8.990e+00	+ 0.000e+00	= 8.990e+00
Alkalinity	2.385e-03	+ 5.009e-05	= 2.436e-03
C(-4)	0.000e+00	+ 0.000e+00	= 0.000e+00
C(4)	2.089e-03	+ -4.388e-05	= 2.046e-03
Ca	1.992e-03	+ -4.183e-05	= 1.950e-03
Cl	1.256e-04	+ 0.000e+00	= 1.256e-04
H(0)	0.000e+00	+ 0.000e+00	= 0.000e+00
K	6.601e-05	+ 6.185e-07	= 6.663e-05
Mg	1.101e-03	+ -7.173e-06	= 1.094e-03
N(0)	0.000e+00	+ 0.000e+00	= 0.000e+00
N(3)	0.000e+00	+ 0.000e+00	= 0.000e+00
N(5)	2.143e-07	+ 0.000e+00	= 2.143e-07
Na	3.320e-04	+ 0.000e+00	= 3.320e-04
O(0)	0.000e+00	+ 0.000e+00	= 0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+ 0.000e+00	= 0.000e+00
S(6)	1.922e-03	+ 4.036e-05	= 1.962e-03

Solution	Minimum	Maximum
Solution 1	1.000e+00	1.000e+00
Solution 2	1.000e+00	1.000e+00

Phase	Minimum	Maximum	
Dolomite	-3.673e-05	-4.179e-05	CaMg (CO3) 2
Gypsum	-7.815e-05	-9.901e-05	CaSO4:2H2O
Halite	-2.571e-05	-3.717e-05	NaCl
Magnesite	1.312e-04	8.952e-05	MgCO3
MgCl2:8H2O	-2.581e-05	-3.566e-05	MgCl2:8H2O
N2(g)	-4.143e-06	-4.234e-06	N2
H2S(g)	5.179e-06	5.064e-06	H2S

Redox mole transfers:

```

N(0)      -8.286e-06
S(-2)     5.179e-06

```

```

Sum of residuals (epsilons in documentation):      1.095e+01
Sum of delta/uncertainty limit:                    1.095e+01
Maximum fractional error in element concentration:  2.100e-02

```

Model contains minimum number of phases.

=====

Summary of inverse modeling:

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIYAL-SAL.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:28 a.m.

Number of models found: 2
Number of minimal models found: 2
Number of infeasible sets of phases saved: 22
Number of calls to cll: 80

End of Run after 2.353 Seconds.

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CICAL-VEA.phr

miércoles, 17 de enero de 2018 12:28 a.m.

TITLE Modelación Inversa San Lorenzo - Vuelta el Agua

PRINT; -reset false; inverse true

SOLUTION 1

```

-units mg/l
pH      8.92
Na       7.47
N(+5) 0.003 as N
K        2.73
Ca      98.84
Mg      39.28
Alkalinity 94.62 as HCO3
Cl       4.32
S(6) 322.03 as SO4

```

SOLUTION 2

```

-units mg/l
pH      9.07
Na       8.26
N(+5) 0.119 as N
K        2.66
Ca      84.49
Mg      25.44
Alkalinity 138.81 as HCO3
Cl       7.19
S(6) 191.39 as SO4

```

INVERSE_MODELING 1

```

-solutions 1 2
-uncertainty 0.025

```

-range

-phases

Calcite	Precip	#CaCO3
Dolomite	Dissolv	#CaMg
Gypsum	Dissolv	#CaSO4 · 2H2O
Halite	Dissolv	#NaCl
Magnesite	Precip	#MgCO3
CO2 (g)	Precip	
MgCl2 · 6H2O		
N2 (g)	Dissolv	
H2S (g)		
CH2O	Dissolv	

-balances

```

Na
Cl
K
S(6)

```

PHASES

CH2O

CH2O = 0.5CO2 + 0.5CH4

log_k 0

H2S (g)

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CICAL-VEA.phr

miércoles, 17 de enero de 2018 12:28 a.m.

```

H2S = H+ + HS-
-log_k -7.9759
-analytic -97.354 -3.1576e-2 1.8285e3 37.44 28.56
MgCl2:6H2O
MgCl2:6H2O = Mg+2 + 2Cl- + 6H2O
-analytic 989.331411 0.28201417 -27059.8088 -395.438891 0 0
Vm 159.08
CO2(g)
CO2 = CO2
-log_k -1.468
-delta_h -4.776 kcal
-analytic 10.5624 -2.3547e-2 -3972.8 0 5.8746e5 1.9194e-5
-T_c 304.2 # critical T, K
-P_c 72.86 # critical P, atm
-Omega 0.225 # acentric factor
N2(g)
N2 = N2
-log_k -3.1864
-analytic -58.453 1.818e-3 3199 17.909 -27460
-T_c 126.2
-P_c 33.50
-Omega 0.039
Sylvite
KCl = K+ + Cl-
log_k 0.900
-delta_h 8.5
-analytic 3.984 0.0 -919.55
Vm 37.5
Magnesite
MgCO3 = CO3-2 + Mg+2
log_k -7.834
delta_h -6.169
Vm 28.3
END

```

[illegible]

F:\TESIS UNIV. TRANSECTO CICAL-VEA.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

Error in subroutine range. Kode = 1

CL1: Roundoff errors in optimization.

Try using -multiple_precision in INVERSE_MODELING

Error in subroutine range. Kode = 1

CL1: Roundoff errors in optimization.

Try using -multiple_precision in INVERSE_MODELING

Error in subroutine range. Kode = 1

CL1: Roundoff errors in optimization.

Try using -multiple_precision in INVERSE_MODELING

Error in subroutine range. Kode = 1

Solution 1:

	Input		Delta		Input+Delta
pH	8.920e+00	+	0.000e+00	=	8.920e+00
Alkalinity	1.882e-03	+	0.000e+00	=	1.882e-03
C(-4)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
C(4)	1.363e-03	+	0.000e+00	=	1.363e-03
Ca	2.467e-03	+	-6.693e-06	=	2.461e-03
Cl	1.219e-04	+	0.000e+00	=	1.219e-04
H(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.986e-05	+	0.000e+00	=	6.986e-05
Mg	1.617e-03	+	0.000e+00	=	1.617e-03
N(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(5)	2.143e-07	+	0.000e+00	=	2.143e-07
Na	3.251e-04	+	0.000e+00	=	3.251e-04
O(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(6)	3.354e-03	+	8.385e-05	=	3.438e-03

Solution 2:

	Input		Delta		Input+Delta
pH	9.070e+00	+	0.000e+00	=	9.070e+00
Alkalinity	2.276e-03	+	5.690e-05	=	2.333e-03
C(-4)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
C(4)	1.947e-03	+	0.000e+00	=	1.947e-03
Ca	2.109e-03	+	-5.273e-05	=	2.056e-03
Cl	2.029e-04	+	0.000e+00	=	2.029e-04
H(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.806e-05	+	0.000e+00	=	6.806e-05
Mg	1.047e-03	+	-1.747e-06	=	1.045e-03
N(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(5)	8.500e-06	+	0.000e+00	=	8.500e-06
Na	3.595e-04	+	0.000e+00	=	3.595e-04
O(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(6)	1.993e-03	+	4.983e-05	=	2.043e-03

F:\TESIS IUNV. TRANSECTO CICAL-VEA.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

Solution fractions:

		Minimum	Maximum	
Solution	1	9.743e-01	9.267e-01	1.000e+00
Solution	2	1.000e+00	1.000e+00	1.000e+00

Phase mole transfers:

		Minimum	Maximum	
Calcite	-4.763e-01	-1.356e+00	-2.442e-04	CaCO3
Gypsum	4.760e-01	0.000e+00	1.355e+00	CaSO4:2H2O
Halite	4.271e-05	1.723e-05	7.468e-05	NaCl
Magnesite	-5.505e-04	-5.589e-04	-4.253e-04	MgCO3
CO2(g)	-4.771e-01	-1.356e+00	-8.936e-04	CO2
MgCl2:8H2O	2.070e-05	3.664e-06	-5.255e-04	MgCl2:8H2O
N2(g)	4.146e-06	4.034e-06	4.259e-06	N2
H2S(g)	-4.773e-01	-1.357e+00	-1.274e-03	H2S
CH2O	9.546e-01	2.537e-03	2.713e+00	CH2O

Redox mole transfers:

C(-4)	4.773e-01
N(0)	8.291e-06
S(-2)	-4.773e-01

Sum of residuals (epsilons in documentation): 4.147e+00
 Sum of delta/uncertainty limit: 4.175e+00
 Maximum fractional error in element concentration: 2.500e-02

Solution 1:

	Input		Delta		Input+Delta
pH	8.920e+00	+	0.000e+00	=	8.920e+00
Alkalinity	1.552e-03	+	0.000e+00	=	1.552e-03
C(-4)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
C(4)	1.363e-03	+	0.000e+00	=	1.363e-03
Ca	2.467e-03	+	-5.819e-06	=	2.462e-03
Cl	1.219e-04	+	0.000e+00	=	1.219e-04
H(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.986e-05	+	-1.746e-06	=	6.811e-05
Mg	1.617e-03	+	0.000e+00	=	1.617e-03
N(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(5)	2.143e-07	+	0.000e+00	=	2.143e-07
Na	3.251e-04	+	0.000e+00	=	3.251e-04
O(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(6)	3.354e-03	+	8.385e-05	=	3.438e-03

Solution 2:

	Input		Delta		Input+Delta
pH	9.070e+00	+	0.000e+00	=	9.070e+00
Alkalinity	2.276e-03	+	5.690e-05	=	2.333e-03
C(-4)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CICAL-VEA.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

C(4)	1.947e-03	+	0.000e+00	=	1.947e-03
Ca	2.109e-03	+	-5.273e-05	=	2.056e-03
Cl	2.029e-04	+	0.000e+00	=	2.029e-04
H(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.806e-05	+	5.064e-08	=	6.811e-05
Mg	1.047e-03	+	-1.773e-06	=	1.045e-03
N(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(5)	8.500e-06	+	0.000e+00	=	8.500e-06
Na	3.595e-04	+	0.000e+00	=	3.595e-04
O(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(6)	1.993e-03	+	4.983e-05	=	2.043e-03

Solution fractions:		Minimum	Maximum
Solution	1	1.000e+00	1.000e+00
Solution	2	1.000e+00	1.000e+00

Phase mole transfers:		Minimum	Maximum	
Calcite	-4.053e-04	-4.707e-04	-3.179e-04	CaCO3
Halite	3.435e-05	1.724e-05	5.147e-05	NaCl
Magnesite	-5.948e-04	-6.722e-04	-5.486e-04	MgCO3
CO2(g)	-1.195e-03	-1.328e-03	-9.398e-04	CO2
MgCl2·8H2O	2.331e-05	1.070e-05	3.593e-05	MgCl2·8H2O
N2(g)	4.143e-06	4.034e-06	4.252e-06	N2
H2S(g)	-1.395e-03	-1.426e-03	-1.274e-03	H2S
CH2O	2.779e-03	2.537e-03	2.842e-03	CH2O

Redox mole transfers:

C(-4)	1.390e-03
N(0)	8.286e-06
S(-2)	-1.395e-03

Sum of residuals (epsilon in documentation):	5.192e+00
Sum of delta/uncertainty limit:	5.192e+00
Maximum fractional error in element concentration:	2.500e-02

Model contains minimum number of phases.

=====

CL1: Roundoff errors in optimization.

Try using -multiple_precision in INVERSE_MODELING

Summary of inverse modeling:

Number of models found: 2
 Number of minimal models found: 1
 Number of infeasible sets of phases saved: 18
 Number of calls to cll: 62

End of Run after 0.685 Seconds.

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIVEA-BAL.phr

miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

TITLE Modelación Inversa Vuelta el Agua - Balamtetic

PRINT; -reset false; inverse true

SOLUTION 1

-units mg/l

pH 9.3
 Na 16.97
 N(+S) 0.120 as N
 K 3.56
 Ca 91.02
 Mg 32.24
 Alkalinity 160.89 as HCO3
 Cl 35.38
 S(6) 183.02 as SO4

SOLUTION 2

-units mg/l

pH 8.92
 Na 7.47
 N(+S) 0.003 as N
 K 2.73
 Ca 98.84
 Mg 39.28
 Alkalinity 94.62 as HCO3
 Cl 4.32
 S(6) 322.03 as SO4

INVERSE_MODELING 1

-solutions 1 2

-uncertainty 0.05

-range

-phases

Calcite	Precip	#CaCO3
Dolomite	Dissolv	#CaMg
Gypsum	Precip	#CaSO4·2H2O
Halite	Precip	#NaCl
Magnesite	Precip	#MgCO3
Sylvite	Precip	#KCl
CO2(g)	Dissolv	
MgCl2·8H2O		
N2(g)	Precip	
H2S(g)		
CH2O	Precip	

-balances

Na
 Cl
 K
 S(6)

PHASES

CH2O

CH2O = 0.5CO2 + 0.5CH4

log_k 0

H2S(g)

H2S = H+ + HS-

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIVEA-BAL.phr

miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

```

-log_k      -7.9759
-analytic   -97.354 -3.1576e-2 1.8285e3 37.44 28.56
MgCl2:8H2O
MgCl2:8H2O = Mg+2 + 2Cl- + 8H2O
-analytic      989.331411      0.28201417      -27059.8088      -395.438891      0      0
Vm 159.08
CO2 (g)
CO2 = CO2
-log_k      -1.468
-delta_h    -4.776 kcal
-analytic     10.5624 -2.3547e-2 -3972.8 0 5.8746e5 1.9194e-5
-T_c      304.2 # critical T, K
-P_c      72.86 # critical P, atm
-Omega     0.225 # acentric factor
N2 (g)
N2 = N2
-log_k      -3.1864
-analytic   -58.453 1.818e-3 3199 17.909 -27460
-T_c      126.2
-P_c      33.50
-Omega     0.039
Sylvite
KCl = K+ + Cl-
log_k      0.900
-delta_h    8.5
-analytic     3.984      0.0      -919.55
Vm 37.5
Magnesite
MgCO3 = CO3-2 + Mg+2
log_k      -7.834
delta_h    -6.169
Vm 28.3
END

```

```

F:\TESIS IUNIV. TRANSECTO CIVEA-BAL.phr.out
miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

Using PHREEQC: version 3.2.2, compiled on August 27, 2015
Input file: VEA-BAL.phr
Output file: VEA-BAL.phr.out
Database file: c:\phreeqc\database\phreeqc.dat

-----
Reading data base.
-----

SOLUTION_MASTER_SPECIES
SOLUTION_SPECIES
PHASES
EXCHANGE_MASTER_SPECIES
EXCHANGE_SPECIES
SURFACE_MASTER_SPECIES
SURFACE_SPECIES
RATES
END

-----
Reading input data for simulation 1.
-----

TITLE Modelación Inversa Vuelta el Agua - Balamtetic
PRINT
reset false
Using C11 standard precision optimization routine.

Solution 1:

      Input      Delta      Input+Delta
pH      9.300e+00 + 0.000e+00 = 9.300e+00
Alkalinity 2.638e-03 + 1.949e-05 = 2.658e-03
C(-4) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
C(4) 2.079e-03 + 0.000e+00 = 2.079e-03
Ca 2.272e-03 + -1.136e-04 = 2.159e-03
Cl 9.985e-04 + 0.000e+00 = 9.985e-04
H(0) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
K 9.109e-05 + 0.000e+00 = 9.109e-05
Mg 1.327e-03 + -6.634e-05 = 1.260e-03
N(0) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
N(3) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
N(5) 8.572e-06 + 0.000e+00 = 8.572e-06
Na 7.385e-04 + 0.000e+00 = 7.385e-04
O(0) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
S(-2) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00
S(6) 1.906e-03 + 9.531e-05 = 2.001e-03

Solution 2:

      Input      Delta      Input+Delta
pH      8.920e+00 + 0.000e+00 = 8.920e+00
Alkalinity 1.552e-03 + 0.000e+00 = 1.552e-03
C(-4) 0.000e+00 + 0.000e+00 = 0.000e+00

```

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIVEA-BAL.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

C (4)	1.363e-03	+	0.000e+00	=	1.363e-03
Ca	2.467e-03	+	0.000e+00	=	2.467e-03
Cl	1.219e-04	+	0.000e+00	=	1.219e-04
H (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.986e-05	+	0.000e+00	=	6.986e-05
Mg	1.617e-03	+	0.000e+00	=	1.617e-03
N (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N (3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N (5)	2.143e-07	+	0.000e+00	=	2.143e-07
Na	3.251e-04	+	0.000e+00	=	3.251e-04
O (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S (-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S (6)	3.354e-03	+	9.055e-05	=	3.445e-03

Solution fractions:		Minimum	Maximum
Solution	1	1.000e+00	1.000e+00
Solution	2	1.000e+00	1.000e+00

Phase mole transfers:		Minimum	Maximum	
Calcite	-2.682e-04	-6.332e-04	0.000e+00	CaCO3
Dolomite	5.770e-04	4.268e-04	7.165e-04	CaMg (CO3) 2
Halite	-4.135e-04	-4.667e-04	-3.603e-04	NaCl
Sylvite	-2.124e-05	-2.929e-05	-1.319e-05	KCl
CO2 (g)	1.273e-03	7.603e-04	1.720e-03	CO2
MgCl2:8H2O	-2.209e-04	-2.796e-04	-1.623e-04	MgCl2:8H2O
N2 (g)	-4.179e-06	-4.399e-06	-3.959e-06	N2
H2S (g)	1.443e-03	1.187e-03	1.622e-03	H2S
CH2O	-2.876e-03	-3.234e-03	-2.363e-03	CH2O

Redox mole transfers:

C (-4)	-1.438e-03
N (0)	-8.358e-06
S (-2)	1.443e-03

Sum of residuals (epsilons in documentation): 3.688e+00
Sum of delta/uncertainty limit: 3.688e+00
Maximum fractional error in element concentration: 5.000e-02

=====

Solution 1:

	Input		Delta		Input+Delta
pH	9.300e+00	+	0.000e+00	=	9.300e+00
Alkalinity	2.638e-03	+	1.319e-04	=	2.770e-03
C (-4)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
C (4)	2.079e-03	+	0.000e+00	=	2.079e-03
Ca	2.272e-03	+	-1.136e-04	=	2.159e-03
Cl	9.985e-04	+	0.000e+00	=	9.985e-04
H (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	9.109e-05	+	0.000e+00	=	9.109e-05
Mg	1.327e-03	+	-1.013e-05	=	1.317e-03
N (0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIVEA-BAL.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

N(3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(5)	8.572e-06	+	0.000e+00	=	8.572e-06
Na	7.385e-04	+	0.000e+00	=	7.385e-04
O(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(6)	1.906e-03	+	9.531e-05	=	2.001e-03

Solution 2:

	Input		Delta		Input+Delta
pH	8.920e+00	+	0.000e+00	=	8.920e+00
Alkalinity	1.552e-03	+	0.000e+00	=	1.552e-03
C(-4)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
C(4)	1.363e-03	+	0.000e+00	=	1.363e-03
Ca	2.467e-03	+	1.234e-04	=	2.591e-03
Cl	1.219e-04	+	0.000e+00	=	1.219e-04
H(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.986e-05	+	0.000e+00	=	6.986e-05
Mg	1.617e-03	+	-8.083e-05	=	1.536e-03
N(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(5)	2.143e-07	+	0.000e+00	=	2.143e-07
Na	3.251e-04	+	-1.556e-05	=	3.095e-04
O(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(6)	3.354e-03	+	1.253e-04	=	3.479e-03

Solution	1	2	Minimum	Maximum
Solution 1	1.000e+00	1.000e+00	1.000e+00	1.000e+00
Solution 2	1.000e+00	1.000e+00	1.000e+00	1.000e+00

Phase	mole	transfers:	Minimum	Maximum	
Dolomite	4.322e-04	4.268e-04	4.322e-04	CaMg(CO3)2	
Halite	-4.290e-04	-4.667e-04	-3.821e-04	NaCl	
Sylvite	-2.124e-05	-2.929e-05	-1.319e-05	KCl	
CO2(g)	1.364e-03	1.104e-03	1.614e-03	CO2	
MgCl2·8H2O	-2.132e-04	-2.591e-04	-1.623e-04	MgCl2·8H2O	
N2(g)	-4.179e-06	-4.399e-06	-3.959e-06	N2	
H2S(g)	1.478e-03	1.429e-03	1.517e-03	H2S	
CH2O	-2.945e-03	-3.023e-03	-2.846e-03	CH2O	

Redox mole transfers:

C(-4)	-1.473e-03
N(0)	-8.358e-06
S(-2)	1.478e-03

Sum of residuals (epsilons in documentation): 6.857e+00
 Sum of delta/uncertainty limit: 6.857e+00
 Maximum fractional error in element concentration: 5.000e-02

Model contains minimum number of phases.

=====

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIVEA-BAL.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

Solution 1:

	Input		Delta		Input+Delta
pH	9.300e+00	+	0.000e+00	=	9.300e+00
Alkalinity	2.638e-03	+	1.949e-05	=	2.658e-03
C(-4)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
C(4)	2.079e-03	+	0.000e+00	=	2.079e-03
Ca	2.272e-03	+	-1.136e-04	=	2.159e-03
Cl	9.985e-04	+	0.000e+00	=	9.985e-04
H(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	9.109e-05	+	0.000e+00	=	9.109e-05
Mg	1.327e-03	+	-6.634e-05	=	1.260e-03
N(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(5)	8.572e-06	+	0.000e+00	=	8.572e-06
Na	7.385e-04	+	0.000e+00	=	7.385e-04
O(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(6)	1.906e-03	+	9.531e-05	=	2.001e-03

Solution 2:

	Input		Delta		Input+Delta
pH	8.920e+00	+	0.000e+00	=	8.920e+00
Alkalinity	1.552e-03	+	0.000e+00	=	1.552e-03
C(-4)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
C(4)	1.363e-03	+	0.000e+00	=	1.363e-03
Ca	2.467e-03	+	0.000e+00	=	2.467e-03
Cl	1.219e-04	+	0.000e+00	=	1.219e-04
H(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
K	6.986e-05	+	0.000e+00	=	6.986e-05
Mg	1.617e-03	+	0.000e+00	=	1.617e-03
N(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(3)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
N(5)	2.143e-07	+	0.000e+00	=	2.143e-07
Na	3.251e-04	+	0.000e+00	=	3.251e-04
O(0)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(-2)	0.000e+00	+	0.000e+00	=	0.000e+00
S(6)	3.354e-03	+	9.055e-05	=	3.445e-03

Solution fractions:		Minimum	Maximum
Solution 1	1.000e+00	1.000e+00	1.000e+00
Solution 2	1.000e+00	1.000e+00	1.000e+00

Phase mole transfers:		Minimum	Maximum	
Dolomite	5.770e-04	4.268e-04	7.164e-04	CaMg (CO3) 2
Gypsum	-2.682e-04	-6.332e-04	0.000e+00	CaSO4:2H2O
Halite	-4.135e-04	-4.667e-04	-3.603e-04	NaCl
Sylvite	-2.124e-05	-2.929e-05	-1.319e-05	KCl
CO2 (g)	1.541e-03	1.104e-03	2.183e-03	CO2
MgCl2:8H2O	-2.209e-04	-2.796e-04	-1.623e-04	MgCl2:8H2O
N2 (g)	-4.179e-06	-4.399e-06	-3.959e-06	N2

F:\TESIS 1UNV. TRANSECTO CIVEA-BAL.phr.out

miércoles, 17 de enero de 2018 12:29 a.m.

H2S(g)	1.711e-03	1.429e-03	2.085e-03	H2S
CH2O	-3.412e-03	-4.160e-03	-2.846e-03	CH2O

Redox mole transfers:

C(-4)	-1.706e-03
N(0)	-8.358e-06
S(-2)	1.711e-03

Sum of residuals (epsilons in documentation): 3.688e+00

Sum of delta/uncertainty limit: 3.688e+00

Maximum fractional error in element concentration: 5.000e-02

=====

Summary of inverse modeling:

Number of models found: 3
 Number of minimal models found: 1
 Number of infeasible sets of phases saved: 17
 Number of calls to cll: 86

End of Run after 0.714 Seconds.
