

# "Realización de trabajos de modelización hidroquímica y fabricación de agua simulada"

## Informe de Asistencia Técnica



*PmaCO2 : El sistema Poroso de las facies Utrillas (Cretácico Inferior): Caracterización de sus propiedades y su influencia en los Mecanismos de Atrapamiento de CO2 en AGPs. 2012-2014*

---

Dr. F. Javier Lillo Ramos

Dña. María Leal Meca

3 Mayo 2012

## 1. INTRODUCCIÓN

En el presente informe se describe la metodología y resultados obtenidos en la modelización geoquímica de la composición de un agua en equilibrio químico con los minerales que constituyen la Formación Utrillas. El objetivo de dicha modelización es la obtención de una composición de referencia para la fabricación de 25 L de agua sintética, la cual será utilizada en los ensayos de inyección de CO<sub>2</sub> que se llevarán a cabo en los materiales de dicha Formación.

Las facies más características de la Formación Utrillas son las denominadas Facies Utrillas, areniscas blanco-amarillentas (a veces abigarradas) de composición fundamentalmente cuarzo-feldespática, con matriz lutítica y cementadas de forma variable por carbonatos. El mineral dominante de la fracción detrítica es el cuarzo (hasta un 84%), seguido de los feldespatos potásicos (hasta un 29%), entre los cuales destacan la ortosa y la microclina. En menor medida se encuentran micas, constituyendo como mucho el 3% de los minerales de la facies. En cuanto a la matriz de las areniscas, está formada mayoritariamente por caolinita y en menor cantidad por illita. El cemento es de naturaleza caliza o dolomita (Marfil y Gomez-Gras, 1992).

## 2. METODOLOGÍA DE LA MODELIZACIÓN

Para la modelización de la composición química del agua se ha utilizado el código hidrogeoquímico PHREEQC, desarrollado por el Servicio Geológico de Estados Unidos (USGS – *United States Geological Survey*). Este código, implementado a través de una aplicación informática, constituye una poderosa herramienta empleada para la modelización de datos hidrogeoquímicos ya que es capaz de simular una variedad de reacciones y procesos tanto en sistemas naturales como en ensayos de laboratorio (Appelo y Postma, 2009). Para el presente estudio resulta de especial interés por su capacidad de establecer el patrón composicional de una determinada solución en equilibrio con las fases minerales constituyentes de la fase sólida reactiva. La aplicabilidad de PHREEQC reside en que permite resolver las mismas ecuaciones que otros códigos (por ejemplo CXTFIT o Standmod), junto a ecuaciones de disolución y precipitación de minerales y adsorción de iones en minerales mediante intercambio catiónico y complejación de superficie (Parkhurst y Appelo, 1999).

Para aplicar PHREEQC se requiere establecer previamente la mineralogía dominante de los materiales que interactúan con el agua, siendo en este estudio la descrita para las facies Utrillas en el apartado de Introducción. Por lo tanto, esos serán los minerales con los que deberá encontrarse en equilibrio la solución a modelizar: cuarzo, feldespato potásico, caolinita, calcita y dolomita. Para la modelización se ha empleado la base de datos *phreeqc.dat* por contener información relativa al nombre, reacción química, log *K* y dependencia de la especiación mineral con la temperatura para los minerales considerados.

Como solución inicial a modelizar, y cuya composición de equilibrio con caolinita, cuarzo, calcita, dolomita y feldespato ha de calcularse, se ha empleado una composición representativa de un agua subterránea (Tabla I) propia de acuíferos de materiales detríticos de composición arcósica (cuarzo-feldespática). El pH es 7.68 y

la temperatura elegida para la simulación ha sido de 31.1 °C, por ser la temperatura a la que se va a realizar el ensayo de inyección por el CIEMAT.

**Tabla I.** Composición típica de agua subterránea en un acuífero detrítico, empleada como solución inicial en la modelización con PHREEQC.

Elemento	Concentración (mg/L)
HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	162,18
Cl <sup>-</sup>	17,68
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	3,28
Ca <sup>2+</sup>	35,98
Mg <sup>2+</sup>	4,60
K <sup>+</sup>	6,33
Na <sup>+</sup>	21,15

En la Tabla II se muestran los datos de entrada introducidos en PHREEQC para la modelización del agua en equilibrio con las fases indicadas anteriormente.

**Tabla II.** Datos de entrada (*input*) en PHREEQC. La palabra clave *SOLUTION 1* indica la composición de la solución inicial, agua típica de un acuífero detrítico. La palabra clave *EQUILIBRIUM\_PHASES* indica aquellas fases minerales con las que debe encontrarse en equilibrio el agua.

```

SOLUTION 1
- units  mg/l
pH      7.68
Temp    31.1
Ca      35.975
Mg      4.6
Na      21.15
K       6.325
Cl      17.675
S(6)    3.275
C(4)    162.175

EQUILIBRIUM_PHASES 1
Calcite  0      0.005
Dolomite 0      0.0025
Kaolinite 0      1
Quartz   0      1
K-feldspar 0      0.005
CO2(g)   -1.5
END
    
```

### 3. RESULTADOS DE LA MODELIZACIÓN

Tras aplicar el modelo, se obtiene una nueva composición de la solución acuosa (Tabla III), ahora en equilibrio químico con las fases minerales consideradas. Dicha composición será la del agua simulada a fabricar y que será utilizada en los ensayos de inyección.

Tabla III. Composición de agua subterránea modelizada con PHREEQC y en equilibrio con las fases minerales estudiadas.

Elemento	Concentración (mg/L)
HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	543,54
Cl <sup>-</sup>	17,68
SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	1,64
Ca <sup>2+</sup>	32,10
Mg <sup>2+</sup>	12,23
K <sup>+</sup>	201,86
Na <sup>+</sup>	21,16
SiO <sub>2</sub>	12,06

#### 4. FABRICACIÓN DEL AGUA SIMULADA

Para obtener los 25 litros con la composición del agua obtenida en el modelo con PHREEQC (Tabla III), se han empleado los siguientes reactivos en las cantidades indicadas:

- 725 mg de NaCl
- 100 mg de MgSO<sub>4</sub>, 7H<sub>2</sub>O
- 900 mg de NaHCO<sub>3</sub>
- 2000 mg de CaCO<sub>3</sub>
- 1025 mg de MgCO<sub>3</sub>
- 12875 mg de KHCO<sub>3</sub>
- 225 mg de SiO<sub>2</sub>

Todos ellos, a excepción del SiO<sub>2</sub>, presentan una elevada solubilidad en agua. Para la disolución de la sílice, se ha realizado una digestión alcalina de acuerdo al protocolo propuesto por Ragueneau y Tréguer (1994), consistente en una digestión con NaOH 0,2 M durante 40 minutos a 100°C.

#### 5. REFERENCIAS

- Appelo, C.A.J., Postma, D. 2009. *Geochemistry, groundwater and pollution*. CRC, 2<sup>a</sup> ed., Amsterdam.
- Marfil, R., Gómez-Gras, D. 1992. Procedencia y modelo diagenético de las areniscas de facies utrillas en la cordillera Ibérica (Umbral de Ateca) y la meseta Norcastellana. *Revista de la Sociedad Geológica de España*, 5 (3-4): 101-115.
- Parkhurst, D.L., Appelo, C.A.J. 1999. *User's guide to PHREEQC (version 2) – A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport and inverse geochemical calculations*. U.S. Geological Survey & Water Resources Investigations, Report 99-4259.
- Ragueneau, O., Tréguer, P., 1994. Determination of biogenic silica in coastal water: applicability and limits of the alkaline digestion method. *Marine Chemistry*, 45: 43-51.