



TEMA DEL ARTÍCULO.

- Ciencia y tecnología

GQAnalyzer: un paquete en R para el análisis de composición química de fluidos hidrotermales

J. Ávila, L. Cárdenas, O. Garcia-Cabrejo, L. Barrantes

Escuela de Ingeniería Geológica, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Sogamoso.

RESUMEN

El software GQAnalyzer se ha desarrollado en el lenguaje de programación para estadística R, el cual es de libre distribución y ofrece múltiples herramientas de visualización y de interacción en web, desarrollado en la Universidad Pedagógica y tecnológica de Colombia, escuela de Ingeniería Geológica, por el Dr. Oscar García Cabrejo. Se recopilaron datos de fuentes hidrotermales de los sistemas geotérmicos, Nevado del Ruíz, Paipa y volcán Puracé para realizar un procedimiento de validación del funcionamiento del paquete en el procesamiento de la información de fluidos geotermiales, además de determinar las ventajas y desventajas que tiene este. Los resultados proporcionados por el software GQAnalyzer fueron comparados, concluyendo que sirve para optimizar los procesos pedagógicos e investigativos en el área de geotermia.

OBJETIVOS

- ❖ Realizar un procedimiento de validación del funcionamiento del paquete GQanalyzer en el procesamiento de información de fluidos geotermiales, empleándolo en el análisis de datos hidrogeoquímicos de diferentes fuentes termiales en Colombia y usando los resultados del software Aquachem® como referencia
- ❖ Determinar las ventajas y desventajas que tiene el paquete GQanalyzer al procesar información de composición química de fluidos hidrotermales con el fin de establecer estrategias de mejoramiento del mismo para optimizar los procesos pedagógicos en el área de la geotermia.

INTRODUCCIÓN

Con el fin de identificar los procesos que controlan e influyen en la evolución geoquímica de las aguas subterráneas y fuentes hidrotermales, se hacen estudios detallados de su composición química determinando los iones y minerales que fueron disueltos en el agua, para tener una idea de cómo fue su formación y las condiciones a la que ha estado expuesta.

Estos estudios han demostrado que el uso de softwar como herramientas de apoyo, permiten realizar una mejor interpretación de la información obtenida en campo. En Colombia el deseo de entender con mayor claridad el funcionamiento y las principales características del recurso hídrico, tanto en hidrogeología como en fuentes termiales,



ha incentivado al desarrollo de software especializado que facilite las tareas de análisis y clasificación de aguas de diferentes tipos. Este software denominado GQAnalyzer se ha desarrollado en el lenguaje de programación para estadística R, el cual es de libre distribución y ofrece múltiples herramientas de visualización y de interacción en web.

El desarrollo de herramientas computacionales para el análisis de la composición química de fluidos hidrotermales requiere de un proceso de validación permanente, de tal manera que el Geólogo e Ingeniero tenga la seguridad que los resultados obtenidos son correctos en las diferentes labores técnicas realizadas. Es por esta razón que se hace necesario realizar una comparación entre los resultados obtenidos con el paquete GQAnalyzer y diferentes casos de estudio colombianos, en donde se han utilizado herramientas computacionales como el Aquachem®.

Paquete GQAnalyzer

El paquete GQAnalyzer tiene como función principal apoyar el análisis de la información hidrogeoquímica tanto para aguas subterráneas como para fluidos termales. Este paquete se encuentra implementado en el lenguaje de programación para estadística R, el cual además de ser de libre distribución cuenta con un ecosistema de más de 13000 paquetes para la realización de diferentes procedimientos estadísticos y de visualización.

Su capacidad analítica cuenta con más de siete gráficos geoquímicos entre los cuales se incluyen el de Piper, Piper modificado, ternario, Durov,

Schoeller, multirectangular, Radial y Stiff, además de presentar, Diagramas de dispersión, entre otras opciones que permiten que el usuario de manera simple y fácil pueda efectuar una mejor interpretación de la información colectada en campo.

METODOLOGÍA

Recopilación de información bibliográfica con datos de fuentes hidrotermales de los sistemas geotérmicos, Nevado del Ruíz, Paipa y volcán Puracé, para ser procesados por el paquete GQAnalyzer, esto con la finalidad de generar los gráficos y los más de siete diagramas disponibles.

En primer lugar, los datos de los fluidos geotérmicos tomados en campo deben ser introducidos en una tabla de Excel, en la cual los valores numéricos deben tener como símbolo decimal el punto (.), es importante aclarar que la tabla debe ser guardada como .CSV (delimitada por comas) o .TXT.

Tabla 1: Analisis químico de las aguas del sistema termal Nevado del Ruiz (Angélica E. Sánchez T. 2014)

	Nombre	Temp	pH	Conductividad	Ca	Mg	Na	K	Cl	SO4	HCO3
1	Botero Londono- La Piscina	91	8	3110	37	2	458	67	846	41.55	186
2	Geissers Botero Londono	92.5	7.7	3600	51	2	564	71	950	45.81	189
3	El Bosque	58.5	6.4	2368	40	11	392	57	610	23.11	216
4	La Laguna	71.5	6.3	3790	58	6	561	64	839	131	243
5	La Poa	26	6.2	1209	97	56	66	13	12.8	213	506
6	Nereidas I	44	6	947	75	22	77	11	4.3	209	361
7	Nereidas II	51	6.4	702	34	21	61	15	3	99.76	344
8	Chorro Negro	53	6.5	1132	27	22	143	40	8.8	315	257

La tabla de Excel debe contener como mínimo la información del pH, conductividad eléctrica, la temperatura, los cationes principales (Ca, Mg, Na, y K) y los aniones principales (HCO₃, Cl y SO₄) (ver tabla 1), sin estos datos será imposible dar un

buen análisis e interpretación a cualquier estudio hidrogeoquímico.

Es trascendental aclarar que esta información de la tabla de Excel será la procesada por el paquete GQAnalyzer, por esto la calidad de los datos introducidos debe ser la mejor, pues de esta dependerán los resultados proporcionados por el paquete, y respectivamente la posible interpretación que le pueda dar el usuario. Listas las tablas de Excel, se define el conjunto de datos geoquímicos y se procede a ejecutar los diagramas disponibles en el GQAnalyzer (ver figura 1).

directa el tipo de reacción química predominante en la muestra de agua.

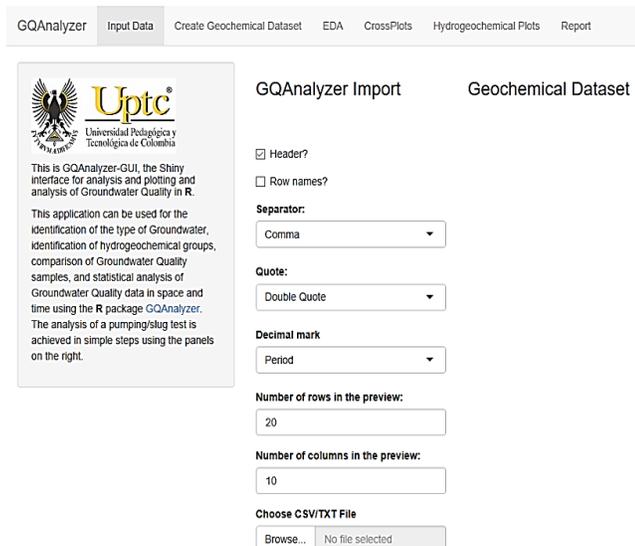


Figura 1: Interfaz del paquete GQAnalyzer (Autores. 2018)

En el caso del volcán Nevado del Ruiz- flanco noroccidental, Colombia (Angélica E. Sánchez T. 2014). Se procedió a crear un diagrama de Piper en el software Aquachem® (ver figura 2) y compararlo con el diagrama de Piper (ver figura 3). Así mismo se elaboró el diagrama de Piper modificado (ver figura 4), diagrama que no se encuentra implementado en Aquachem®. Con este diagrama es posible determinar de manera

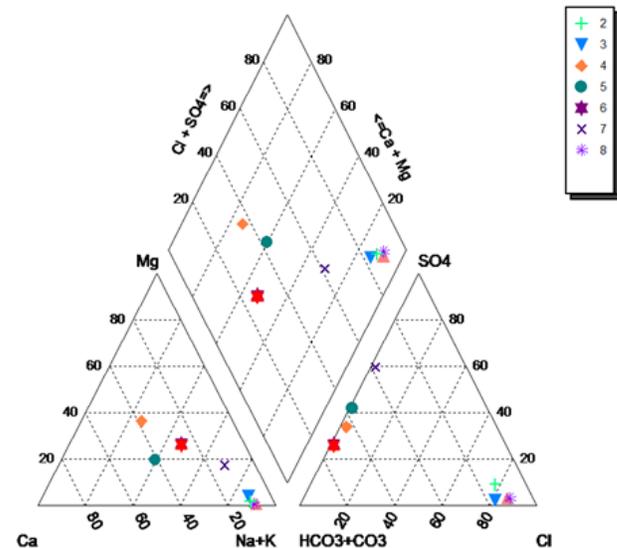


Figura 2: Diagrama de Piper elaborado con el software Aquachem. (Autores. 2018)

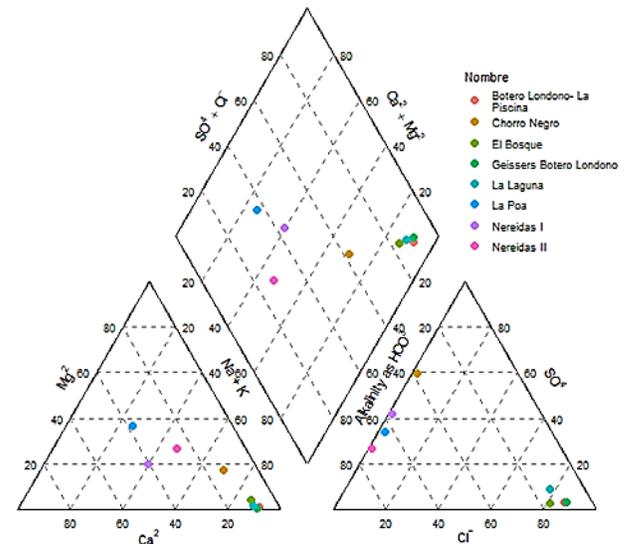


Figura 3: Diagrama de Piper elaborado con el paquete GQAnalyzer. (Autores. 2018)

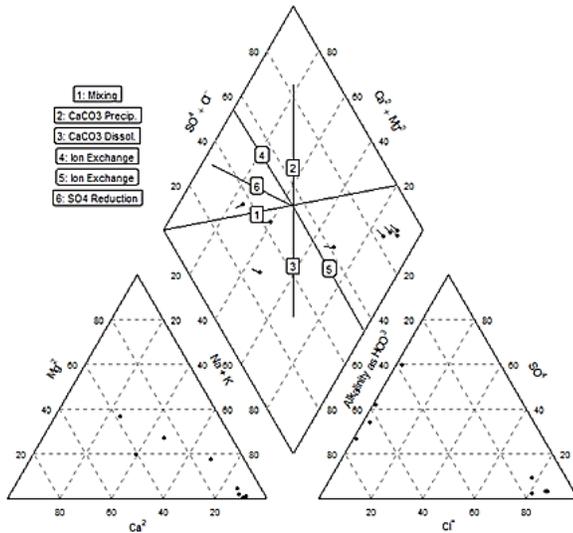


Figura 4: Diagrama de Piper modificado elaborado con el paquete GQAnalyzer. (Autores. 2018)

Así mismo se realizó una comparación con el diagrama de Schoeller considerado un diagrama semilogarítmico que muestra la concentración de los principales iones en los fluidos geotermiales (Ca, Cl, CO₃, HCO₃, K, Mg, Na SO₄) en miliequivalentes ampliamente utilizado para el análisis de información de fluidos geotermiales. En esta comparación se usaron ocho datos del muestreo de agua del trabajo de Sanchez (2014) y los resultados se presentan en la figura 5 (Aquachem®) y la figura 6 (GQAnalyzer).

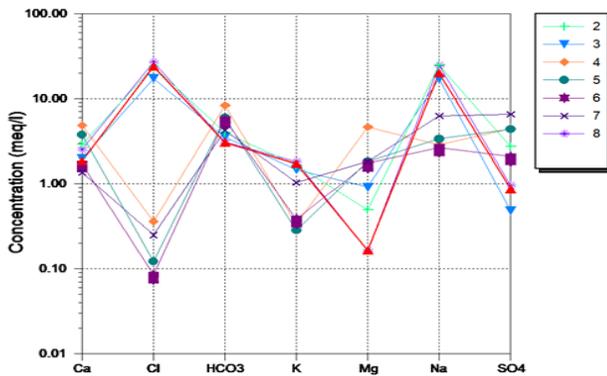


Figura 5: Diagrama de Schoeller elaborado con el software Aquachem. (Autores. 2018)

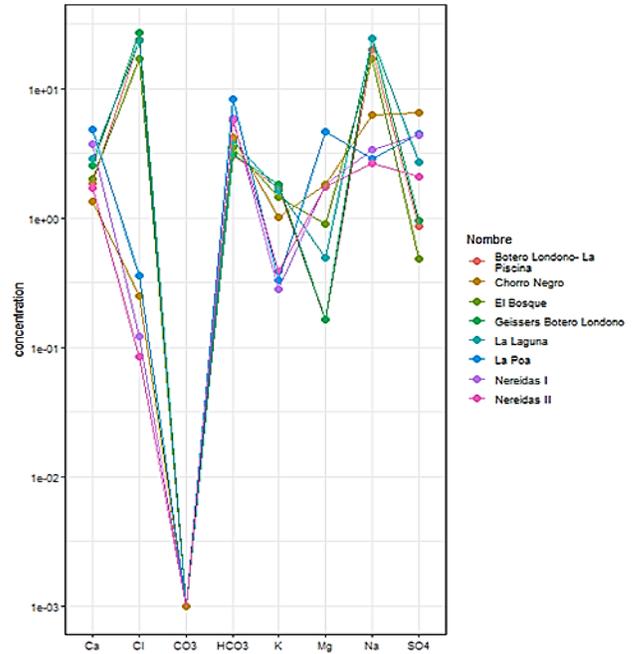


Figura 6: Diagrama de Schoeller elaborado con el paquete GQAnalyzer. (Autores. 2018)

Se realizó una comparación del diagrama Ternario del trabajo Estudio geoquímico preliminar de aguas termales en el sistema volcánico Puracé (Gómez-Díaz, E. & Marin-Cerón. 2018), para determinar el tipo de agua donde se relacionaron los iones (Cl, SO₄, HCO₃), estas comparaciones se observan en las figuras 7 y 8 (GQAnalyzer).

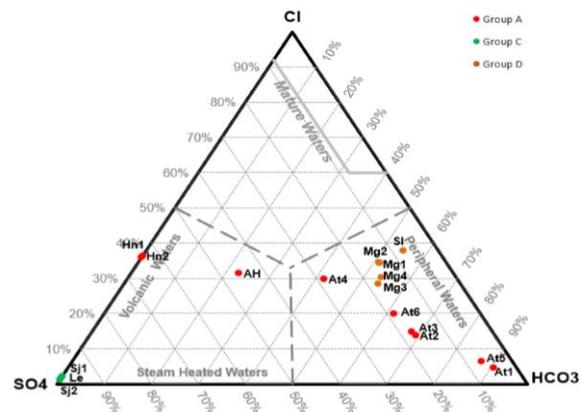


Figura 7: diagrama Ternario de estudio de aguas termales del volcán Puracé (Gómez-Díaz, E. & Marin-Cerón 2018)

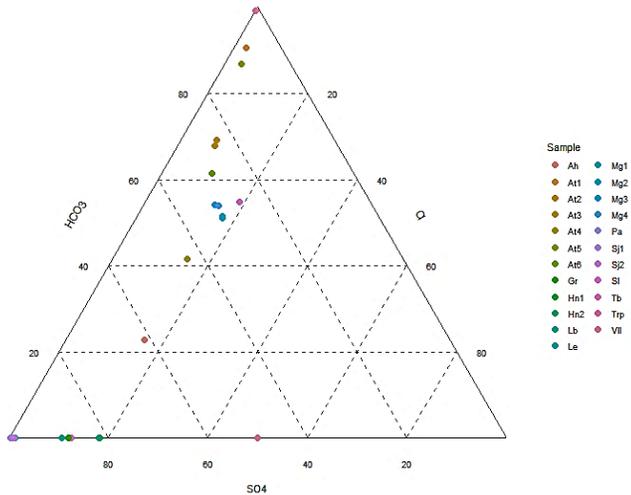


Figura 8: Diagrama ternario procesado con el paquete GQAnalyzer. (Autores. 2018)

Para la comparación de los diagramas de dispersión se emplearon los datos de fluidos geotermales de Paipa reportados en Alfaro (2002). En este caso se comparan el diagrama del Na vs HCO₃ presentados por este autor (ver figura 9) y el diagrama de dispersión elaborado con GQAnalyzer (ver figura 10), en el cual se añadió el pH con el fin de establecer la influencia de esta variable en las concentraciones de Na y HCO₃.

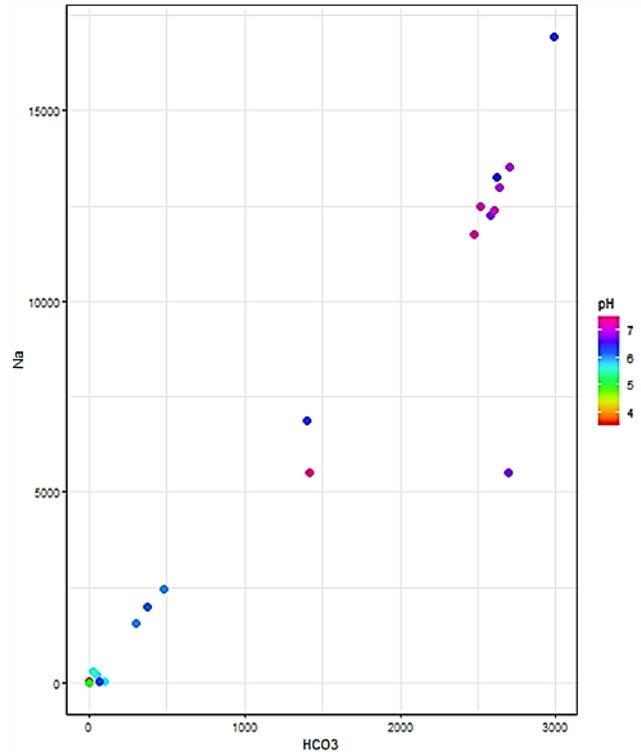


Figura 10: Variación de concentración de Na en función de la concentración de HCO₃. (Autores. 2018)

RESULTADOS

El paquete GQAnalyzer, procesa los datos de la química del agua, proporcionando más de siete diagramas diferentes y gráficos, que permiten al usuario interactuar con la información, de manera rápida y sencilla, además de brindarle la oportunidad de realizar una mejor interpretación de los datos, este cuenta con las herramientas necesarias para calcular, analizar, interpretar y comparar la información de fuentes hidrotermales.

Para el trabajo Geoquímica de las interacciones fluido-roca en el volcán Nevado del Ruiz- flanco noroccidental, Colombia (Angélica E. Sánchez T. 2014), se tomaron ocho datos del muestreo de las aguas del Ruiz para poder comparar el diagrama de Piper del software Aquachem®, y los

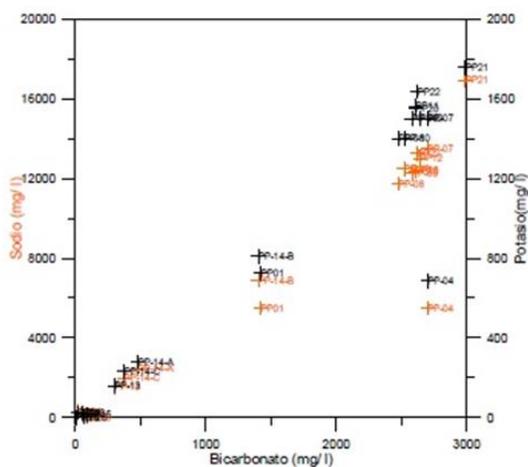


Figura 9: Variación de las concentraciones de Na y K en función de la concentración de HCO₃. (Claudia M. Alfaro V. 2002)



RENAG
REUNION NACIONAL DE GEOTERMIA

Bogotá
2018



ASOCIACIÓN GEOTÉRMICA COLOMBIANA

diagramas de Piper y Piper modificado (ver figura 4) del software GQAnalyzer, obteniendo no solo información semejante, si no la oportunidad de visualizar un diagrama de Piper modificado que proporciona una información más detallada que el diagrama genérico, en este se visualiza que el 50% de las muestras experimentaron un proceso de intercambio iónico, un 25% de las muestras pertenecen a mezcla de aguas, y el otro 25% experimentaron una reducción de SO_4 , características no visibles en el diagrama del software Aquachem®.

Para el diagrama de Schoeller, se utilizaron los datos del muestro de aguas pertenecientes al Nevado del Ruiz, obteniendo los mismos resultados con el software GQAnalyzer, el software Aquachem® y los propuestos en el trabajo de investigación propuesto para el Nevado del Ruiz; es importante aclarar que para el contenido de CO_3 no se tienen datos dispuestos en la tabla de Excel, pues no estaban descritos en el trabajo de investigación, y por esta razón se observa un cambio abrupto de las línea, mostrando una tendencia a cero, además se observa un mayor concentración de Cl y Na en los manantiales la piscina, El Bosque, Geisser y la Laguna, y menor concentración de SO_4 y HCO_3 en los manantiales Neridas I Y II, Chorro Negro y La Poa, dividiendo estos en dos subgrupos de características fisicoquímicas semejantes (Angelíca E. Sánchez T. 2014) (ver figura 6).

En el caso del diagrama ternario la información obtenida también coincide con el trabajo propuesto, las aguas varían entre bicarbonatadas a sulfatadas de cloruro que puede ser causado por la diferente distancia a el cráter del volcán, en las áreas más lejanas presenta aguas enriquecidas de

bicarbonato, mientras que en las áreas cercanas al volcán están enriquecidas en sulfatos y cloruro (Gómez-Díaz, E. & Marin-Cerón 2018).

Los gráficos de dispersión propuestos en el trabajo Geoquímica del sistema geotérmico de Paipa (Claudia M. Alfaro V. 2002), muestran no solo son semejantes, por el contrario el ejecutado en el paquete GQAnalyzer permite adicionar una escala de color de pH, conductividad, TDS, o temperatura, lo cual brinda más información, en este caso se decidió adicionar la paleta de colores de pH a la gráfica de variación de cationes en función de los aniones Na vs HCO_3 (ver figura 10), mostrando que los datos tienden de un pH ácido a uno neutro, información adicional que permite hacer una mejor interpretación de los datos, pues en la figura 9 solo se observa una tendencia lineal donde el manantial PP-04, señala una contribución que podría ser geotérmica. (Claudia M. Alfaro V. 2002)

CONCLUSIONES

El paquete GQAnalyzer, es una aplicación computacional eficiente para procesar, analizar e interpretar los datos de aguas subterráneas incluyendo fuentes hidrotermales. Al comparar los resultados obtenidos con los proporcionados por el software Aquachem y los reportados en los diferentes trabajos investigativos se determinó que es una herramienta confiable, pues los diferentes diagramas geoquímicos y gráficos presentes en este trabajo muestran una gran similitud en la información obtenida. Es importante resaltar que es una herramienta que está en proceso de desarrollo por lo cual hay funciones importantes que aún se deben integrar, como el cálculo de los geotermómetros que será de gran utilidad para estudios hidrotermales.



Uno de los beneficios al usar el paquete GQanalyzer es la manera de procesar los datos ya que es muy fácil y sencillo, los gráficos arrojan automáticamente los nombres de los puntos de agua que son nombrados al tomar las muestras en campo y además de esto en cada grafico o diagrama se puede evidenciar la variación en la paleta de colores ya sea de (pH, conductividad, TDS, o temperatura) en cada una de las muestras estudiadas, lo cual ayuda a dar un mejor análisis en la interpretación de los resultados.

El paquete GQAnalyzer es una herramienta de libre distribución que puede ser usada para calcular, analizar, interpretar y comparar la información de las fuentes hidrotermales, y que además de esto cuenta con diagramas modificados para darle al usuario mayor facilidad a la hora de interpretar los resultados, optimizando los procesos pedagógicos e investigativos en el área de la geotermia.

REFERENCIAS

Djamin, M and Atmojo, J.P.: *Utilization of geothermal energy as an alternative solution in overcoming energy crisis in Indonesia* (in Indonesian). Oral presentation in One-day Geothermal Energy Seminar, Universitas Negeri Padang. (2005).

Fridleifsson, I.B.: Human resources in geothermal development. Proc. 17th New Zealand Geothermal Workshop, Auckland, New Zealand. pp. 7 – 11. (1995).

Fridleifsson, I.B.: Geothermal training in Iceland 1979 – 1999. *Proc. World Geothermal Congress 2000*, Kyushu – Tohoku, Japan. pp. 565 – 571. (2000).

Claudia M. Alfaro V.: Geoquímica del sistema geotérmico de Paipa, cooperación ingeniería “aplicación de técnicas isotópicas a la exploración geotérmica”. Bogotá (2002),

Angélica E. Sánchez T.: Modelación Geoquímica de las interacciones fluido-roca en el volcán Nevado del Ruiz- flanco noroccidental, Colombia. Facultad de Ciencias, Departamento de Geociencias, Universidad Nacional de Colombia. Bogotá (2014)

Gómez-Díaz, E. & Marin-Cerón, M.I. Preliminary geochemical study of thermal waters at the Puracé volcano system (South Western Colombia): an approximation for geothermal exploration. *Boletín de Geología*, 40(1), 43-61. (2018)