

# MODELIZACIÓN TEÓRICA DEL TRANSPORTE DE VAPOR DE MERCURIO A PARTIR DE ZONAS MINERALIZADAS: APLICACIÓN A LA LOCALIZACIÓN DE YACIMIENTOS EPITERMALES

NAVARRO FLORES, A.

Universidad Politécnica de Cataluña. Dpto. de Mecánica de Fluidos. Terrasa

## RESUMEN

*La movilización de vapor de mercurio a través del suelo no saturado y procedente de mineralizaciones, fundamentalmente yacimientos epitermales, puede abordarse mediante el empleo de métodos numéricos, si el fenómeno puede simplificarse notablemente, y se disponen de datos de emanación de vapor de Hg, y se conoce razonablemente la estructura geológica del medio rocoso y sus propiedades hidráulicas.*

*Considerando que el foco emisor de vapor de mercurio se encuentra a poca profundidad, y existen varios focos discretos con concentraciones distintas se ha simulado por diferencias finitas la propagación de vapor de Hg en un medio con una difusividad preferencial en sentido vertical y en condiciones de flujo monocomponente en medio exclusivamente saturado por la fase gaseosa.*

*Los resultados obtenidos mediante la modelización, y su comparación con los valores reales detectados mediante el empleo de un detector de mercurio, pueden ayudar a conocer la profundidad y concentración de Hg en el yacimiento mineral.*

**Palabras clave:** Mercurio, difusión, diferencias finitas, epitermal, transporte, gas, suelo.

## ABSTRACT

*Mercury vapour propagation by non saturated soil and originated in epithermal mineralizations, can be explained by numeric methods use, if the phenomenon is very simple, and we have sufficient propagation mercury vapour data, and we reasonably know geological structure of rock medium and their hydraulic properties.*

*In the base that mercury vapour focus is shallow, and there are some discretely forms with different concentrations, we simulated by finite differences the propagation of mercury vapour in preferential diffusivity media with monocomponent flow conditions in only gas saturated porous media.*

*Confrontation of results simulated and real detected values can help to localize the depth and Hg concentration of mineral deposits.*

**Key words:** Mercury, diffusion, finites differences, epithermal, transport, gas, oil.

## INTRODUCCIÓN

En este trabajo se aborda el análisis de la propagación de vapor de mercurio a partir de una zona teóricamente mineralizada, como sería el caso de un yacimiento epitermal que presenta elevados contenidos en Au, Ag, Sb, As y Hg, así como una elevada emisión de vapor de mercurio.

Los contenidos de mercurio en los suelos y mineralizaciones del SE peninsular oscilan entre pocas ppm y contenidos del orden del 4% en peso, apareciendo el mercurio en forma de cinabrio en la mayor parte de casos conocidos (Viladevall et al. 1993).

La oxidación de los depósitos de cinabrio puede originar una emisión de mercurio metálico en forma gaseosa que se ha difundido a través de la matriz porosa del suelo y de la cobertera que cubre el yacimiento, formando un halo que es producto del equilibrio entre el mercurio en la atmósfera, en la materia orgánica del suelo, en el agua de la zona no saturada y en la roca mineralizada (Kothny, 1973).

## MOVIMIENTO DE VAPOR DE MERCURIO POR DIFUSIÓN

El transporte de gases en medios porosos no saturados es un proceso complejo que comprende tres mecanismos básicos de transporte (Masmann y Farrier, 1992): Difusión de Knudsen, difusión multicomponente y flujo viscoso.

El fenómeno de la difusión de Knudsen se produce cuando la cantidad de gas es muy baja, o si los poros a través de los cuales viaja el gas son muy pequeños. No obstante, cuando la permeabilidad intrínseca del medio poroso es superior a  $10^{-10}$  cm<sup>2</sup>, éste efecto puede despreciarse, y además el flujo gaseoso puede aproximarse mediante un flujo monocomponente sin cometer errores excesivos (Masmann y Farrier op. cit.).

En estas condiciones el transporte de un gas en un medio poroso no saturado, si los poros son grandes y el gas relativamente denso, puede expresarse, para un flujo unidimensional, de la forma siguiente (Simunek y Suárez, 1993):

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial Z} (J_{da} + J_{dw} + J_{ca} + J_{cw}) - Q \cdot C_w + S \quad (1)$$

donde:

$\vec{J}_{da}$  = flujo causado por la difusión en la fase gaseosa [LT<sup>-1</sup>]

$\vec{J}_{dw}$  = flujo causado por la dispersión en la fase disuelta [LT<sup>-1</sup>]

$\vec{J}_{ca}$  = flujo causado por la convección en fase gaseosa [LT<sup>-1</sup>]

- $\vec{J}_{cw}$  = flujo causado por la convección en la fase disuelta [LT<sup>-1</sup>]  
 $C_T$  = concentración total volumétrica del gas [L<sup>3</sup> L<sup>-3</sup>]  
 $S$  = término de fuente o sumidero de gas [L<sup>3</sup> L<sup>-3</sup> T<sup>-1</sup>]  
 $Q \cdot C_w$  = gas disuelto movilizadado del suelo por la actividad de las plantas [L<sup>3</sup> L<sup>-3</sup> T]

Teniendo en cuenta que en zonas someras sin gradientes importantes de temperatura, el flujo convectivo puede ser despreciado, y considerando que el flujo de vapor de mercurio se produce únicamente por difusión molecular se verificará que el flujo macroscópico de vapor de mercurio vendrá dado por la expresión:

$$J = - \vec{D}_d^* \cdot \epsilon \nabla C\alpha \quad (2)$$

donde:

- $\vec{J}$  : flujo debido a la difusión molecular [M/L<sup>2</sup> t]  
 $\epsilon$  : porosidad  
 $D_d^*$  : coeficiente de difusión bulk [ L<sup>2</sup>/t ]  
 $C\alpha$  : masa de soluto por unidad de volumen de la fase  $\alpha$  [ M/L<sup>3</sup> ]

Siendo además  $D_d^*$  función de la tortuosidad del medio y de un coeficiente de difusión molecular fluidodinámico:

$$D_d^* = D_d \cdot 1 / \tau \quad (3)$$

- $D_d$  : coeficiente de difusión fluidodinámico [ L<sup>2</sup>/t ]  
 $\tau$  : tortuosidad [ L/L ]

Para un flujo difusivo en un sistema bidimensional, considerando la ecuación de conservación de masa y la expresión [2] obtenemos la ecuación de la difusión en dos dimensiones:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = \frac{1}{D_d^*} \cdot \frac{\partial C}{\partial t}$$

en la cual se asume que porosidad y difusión «bulk» son constantes.

### MODELO DISPERSIVO BIDIMENSIONAL

Para simular el movimiento de vapor de mercurio en un terreno homogéneo partimos de la ecuación básica:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} D_d^* + \frac{\partial}{\partial y} D_d^*$$

Dicha ecuación puede ser resuelta en diferencias finitas mediante un balance de masas en un volumen de control rectangular (fig.1).

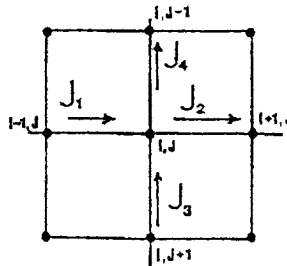


FIG.1.- Balance en el volumen de control

Los flujos en el volumen de control son los siguientes:

$$J_1 = D_{i-1,j,2} \cdot \frac{(C_{i-1,j} - C_{ij}) \cdot \Delta y}{\Delta x}$$

$$J_2 = D_{i,j,2} \cdot \frac{(C_{i,j} - C_{i+1,j}) \cdot \Delta y}{\Delta x}$$

$$J_3 = D_{i,j+1,1} \cdot \frac{(C_{i,j+1} - C_{ij}) \cdot \Delta x}{\Delta y}$$

$$J_4 = D_{i,j-1,1} \cdot \frac{(C_{i,j} - C_{i,j-1}) \cdot \Delta x}{\Delta y}$$

$$J_5 = e \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \frac{(C_{ij} - C_{ij}^*)}{\Delta t}$$

Siendo  $J_5$  el flujo de mercurio extraído o añadido al volumen de control, y donde es  $C_{ij}^*$  la concentración en el intervalo de tiempo anterior.

La ecuación de balance será, por tanto, la siguiente:

$$J_1 + J_2 = J_2 + J_4 + J_5 \quad (11)$$

Sustituyendo en la ecuación de balance se obtiene:

$$\begin{aligned} & \frac{D_{i-1,j,2} (C_{i-1,j} - C_{ij}) \cdot \Delta y}{\Delta x} + \frac{(C_{i,j+1,1} - C_{ij}) \cdot \Delta x}{\Delta y} = \\ & = \frac{D_{i,j,2} (C_{i,j} - C_{i+1,j}) \cdot \Delta y}{\Delta x} + \frac{D_{i,j-1,1} (C_{i,j} - C_{i,j-1}) \cdot \Delta x}{\Delta y} + \\ & + \frac{\varepsilon \cdot \Delta x \cdot \Delta y (C_{ij} - C_{ij}^*)}{\Delta t} \end{aligned}$$

En el caso de malla cuadrada, multiplicando ambos miembros por  $\Delta x^2$  se obtiene:

$$\begin{aligned} & \frac{D_{i-1,j,2} (C_{i-1,j} - C_{ij})}{\Delta x^2} + \frac{D_{i,j,2} (C_{i+1,j} - C_{ij})}{\Delta x^2} + \\ & + \frac{D_{i,j,1} (C_{i,j,1} (C_{i,j+1} - C_{ij}))}{\Delta y^2} + \frac{D_{i,j-1,1} (C_{i,j-1} - C_{ij})}{\Delta y^2} = \\ & = \frac{\varepsilon \cdot (C_{i,j} - C_{ij}^*)}{\Delta x \cdot \Delta y} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & D_{i-1,j,2} (C_{i-1,j}) + D_{i,j,2} (C_{i+1,j} - C_{ij}) + D_{i,j,1} (C_{i,j+1} - C_{ij}) + \\ & + D_{i,j-1,1} (C_{i,j-1} - C_{ij}) = \varepsilon \frac{\Delta x^2}{\Delta t} (C_{ij} - C_{ij}^*) \end{aligned}$$

Agrupando términos en  $C_{ij}$  tendremos:

$$\begin{aligned}
 & C_{ij} \cdot (D_{i-1,j,2} + D_{i,j,2} + D_{i,j,1} + D_{i,j-1,1} + \epsilon \frac{\Delta x^2}{\Delta t} - \\
 & - (D_{i-2,j,2} (C_{i-1,j}) - D_{i,j,2} (C_{i+1,j}) - D_{i,j,1} (C_{i,j+1}) - D_{i,j-1,1} (C_{i,j-1})) = \\
 & = \epsilon \frac{\Delta x^2}{\Delta t} (C_{ij}^*)
 \end{aligned}$$

La ecuación anterior se plantea para cada nudo y se resuelve por filas o por columnas utilizando el método de eliminación de Gauss.

### SIMULACIÓN DEL TRANSPORTE DE VAPOR DE MERCURIO.

Para simular el movimiento difusivo de vapor de mercurio se ha considerado un perfil vertical de terreno de 60 m de anchura y 90 de profundidad, que se ha subdividido en celdas cuadradas de 6 x 6 m (fig.2).

Se ha considerado un medio heterogéneo en el que se supone una variación del coeficiente de difusión desde valores de 4'83 m<sup>2</sup>/día para la difusión efectiva (Ruan et al. 1985) en las zonas más difusivas y valores de 0'1 m<sup>2</sup>/día para las áreas de menor difusividad asimilables a materiales arcillosos. La porosidad del medio se ha supuesto homogénea, asignándose un valor del 0'07 para toda el área discretizada. La comparación entre la solución analítica y la solución numérica muestra la bondad del método de resolución (fig.3).

En el caso de datos reales obtenidos en el campo se utilizan dispositivos de extracción que succionan una cierta cantidad de aire con Hg, a razón de caudales constantes del orden de 0'75 10<sup>-3</sup> m<sup>3</sup>/mto (fig.4).

Los valores de equilibrio (fig.5) responden, por tanto, a una situación de flujo convectivo producido por la succión del aparato, de ahí que los valores de concentración real utilizables para contrastar el resultado del modelo de simulación no puedan utilizarse, en un sentido totalmente riguroso, si no se modifican los dispositivos de detección, de manera que se evite el fenómeno convectivo asociado a la succión.

En la simulación de la propagación de vapor de mercurio se ha considerado inicialmente la existencia de una zona de difusividad alta, asociable a un área de mayor permeabilidad vertical, en la cual la difusión «bulk» oscilaba entre 4'8 y 4'1 m<sup>2</sup>/día a lo largo de la columna x = 4 del modelo, y una capa superficial de alta difusión (fig.6). Al mismo tiempo se asignaban a 24 m de profundidad 7 focos puntuales de emisión de vapor de mercurio con concentraciones que oscilaban entre 1 y 888 µg/m<sup>3</sup>.

En posteriores simulaciones se consideró un foco puntual de emisión de vapor de mercurio, observándose en los resultados obtenidos una propagación del vapor de mercurio en forma de frente abrupto, tanto si se consideraba un foco emisor asociado a

un medio poco poroso (fig.7), como un foco puntual asociado a un medio muy poroso (fig.8).

En situaciones que recuerden a yacimientos en áreas fisuradas como el Valle del Azogue, se podría considerar un medio homogéneo poco permeable ( $\alpha = 0'07$ ), una difusión de mercurio preferencial en la vertical, y en un área equidistante de los límites de la zona mineralizada, y unos focos puntuales de emisión de vapor de mercurio con concentraciones entre 1 y 800  $\mu\text{g}/\text{m}^3$  (fig.9).

En esta última simulación se eliminó la capa superficial de alta difusividad, obteniéndose al cabo de 3 años de simulación unas concentraciones de vapor de mercurio estacionarias en la superficie y similares a las obtenidas por dispositivos de succión, aunque la existencia de un transporte convectivo producido por el aparato, impide una comparación efectiva entre el modelo numérico y los datos de campo (fig.10).

## CONCLUSIONES

La propagación de vapor de mercurio a partir de zonas mineralizadas y a través de suclos no saturados obedece fundamentalmente a un proceso difusivo, que puede aproximarse a un flujo monocomponente de Hg gas, en el que pueden despreciarse los fenómenos viscosos y la difusión de Knudsen.

Dicho fenómeno puede simularse mediante métodos numéricos para un flujo exclusivamente difusivo, pudiendo reproducirse en una primera aproximación el fenómeno de movilización de Hg a partir de mineralizaciones epitermales.

La comparación entre los resultados simulados, y los datos reales de concentración de Hg en el campo cuando éstos procedan del empleo de sistemas «no succionadores», pueden ayudar a localizar la profundidad de la zona mineralizada, sus características básicas e incluso aproximarse al conocimiento de la concentración inicial de vapor de mercurio en el foco.

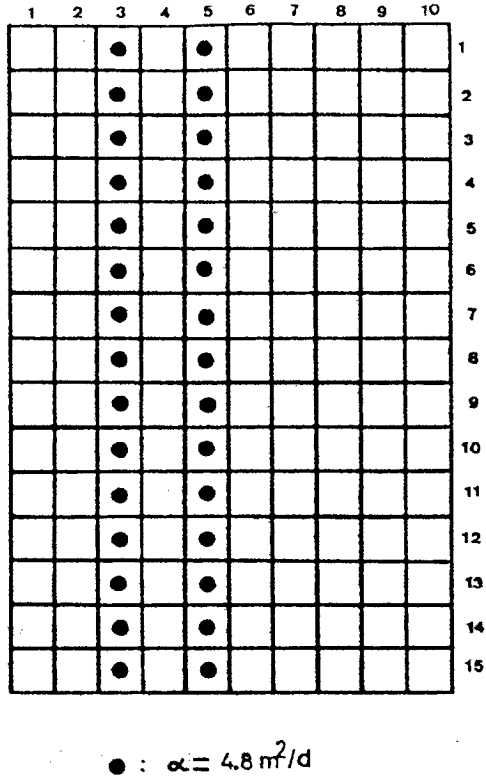


FIG. 2.- Discretización utilizada en el modelo de simulación.

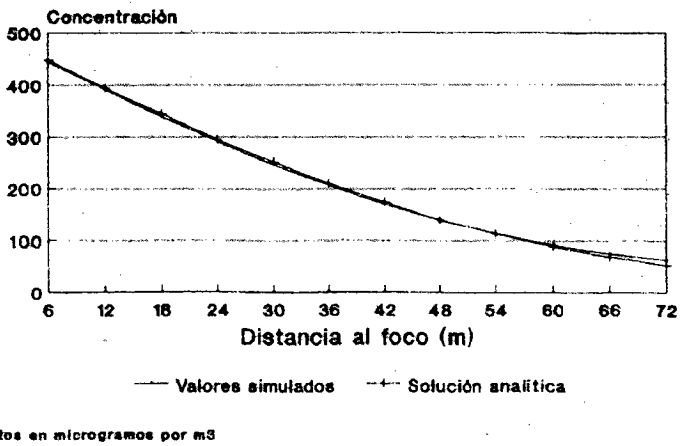


FIG. 3.- Resultados del modelo. Comparación entre valores simulados y valores analíticos.



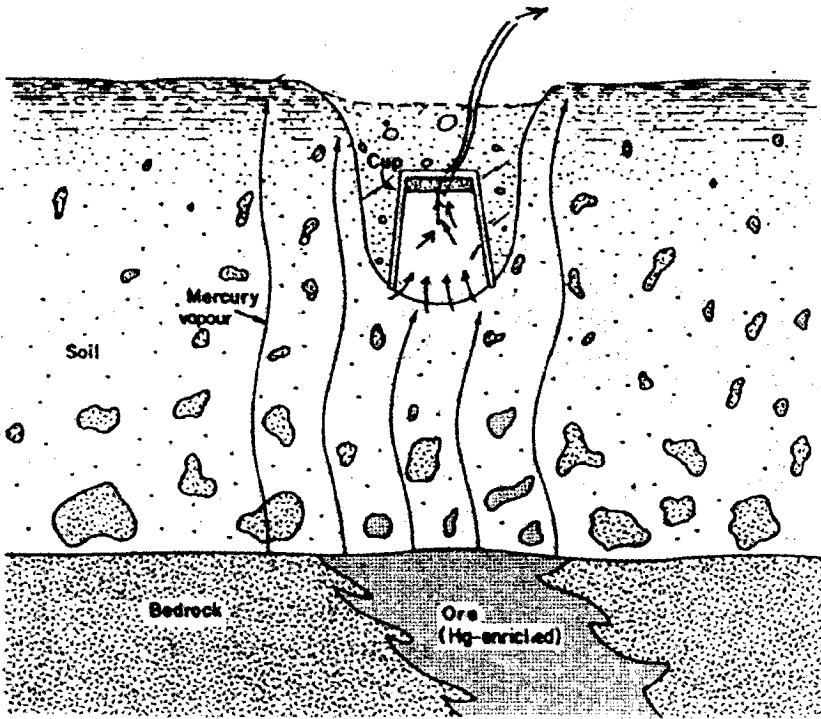


FIG. 4.- Esquema del dispositivo utilizado en la detección de vapor de mercurio.

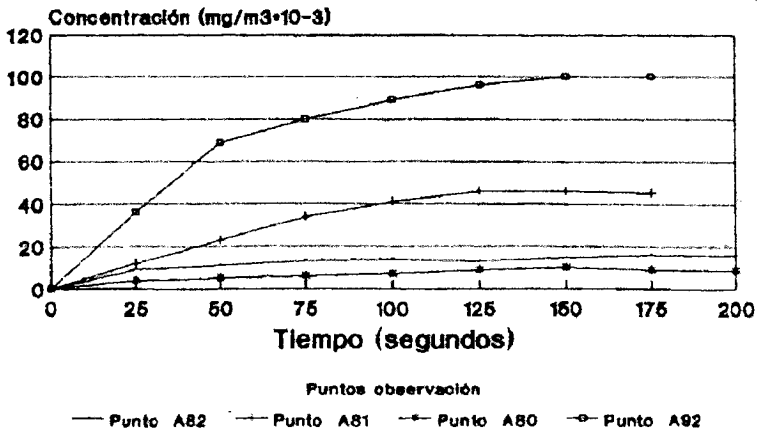


FIG. 5.- Evolución de las concentraciones de vapor de mercurio en distintos puntos, durante la toma de datos.

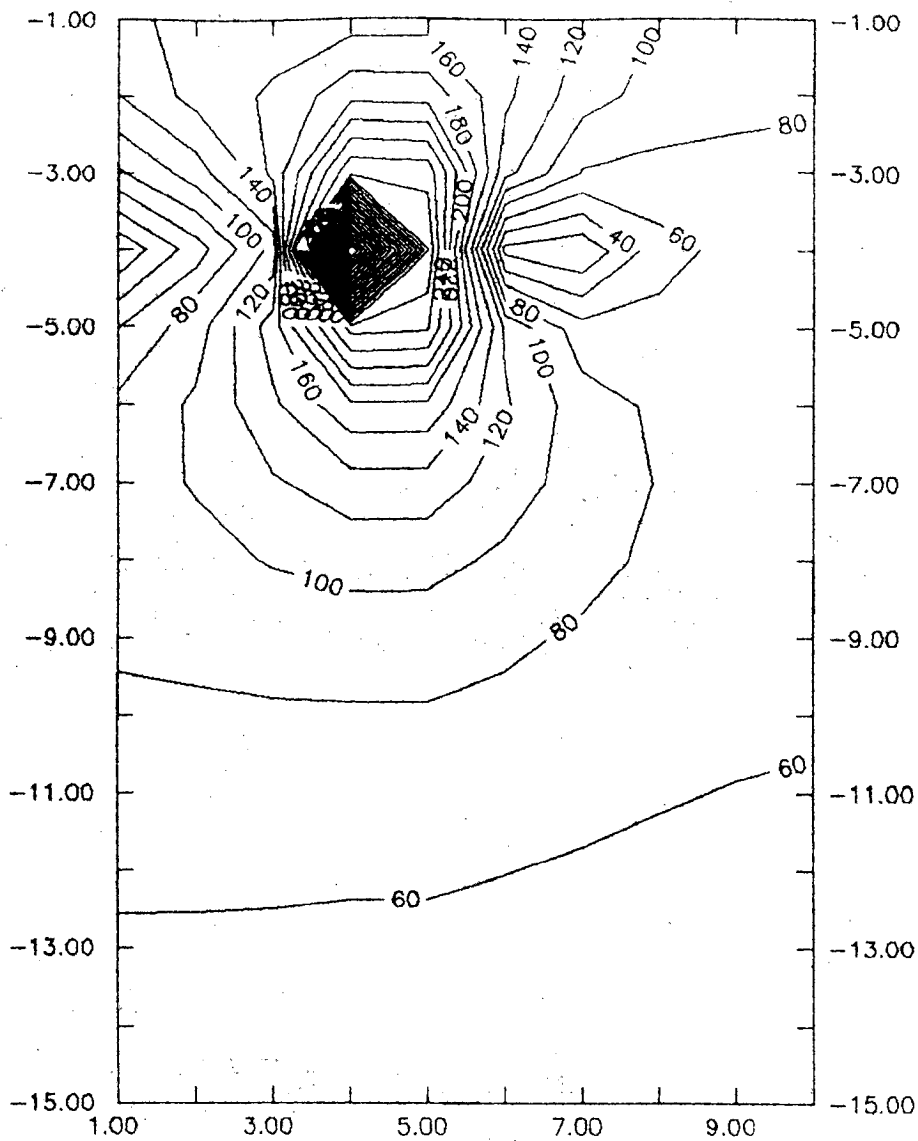


FIG. 6.- Isoconcentraciones de vapor de mercurio.

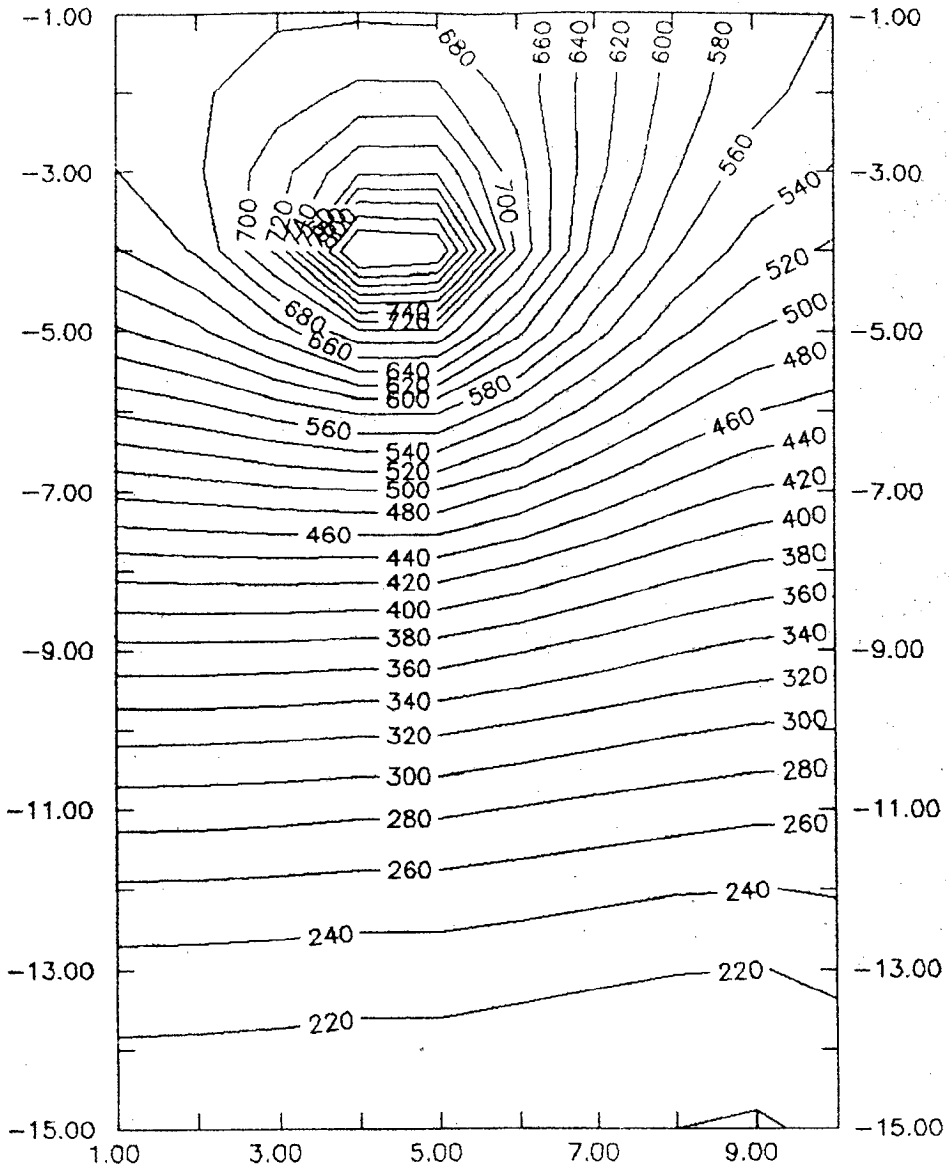


FIG. 7.- Simulación de la propagación de vapor de mercurio a partir de un foco puntual

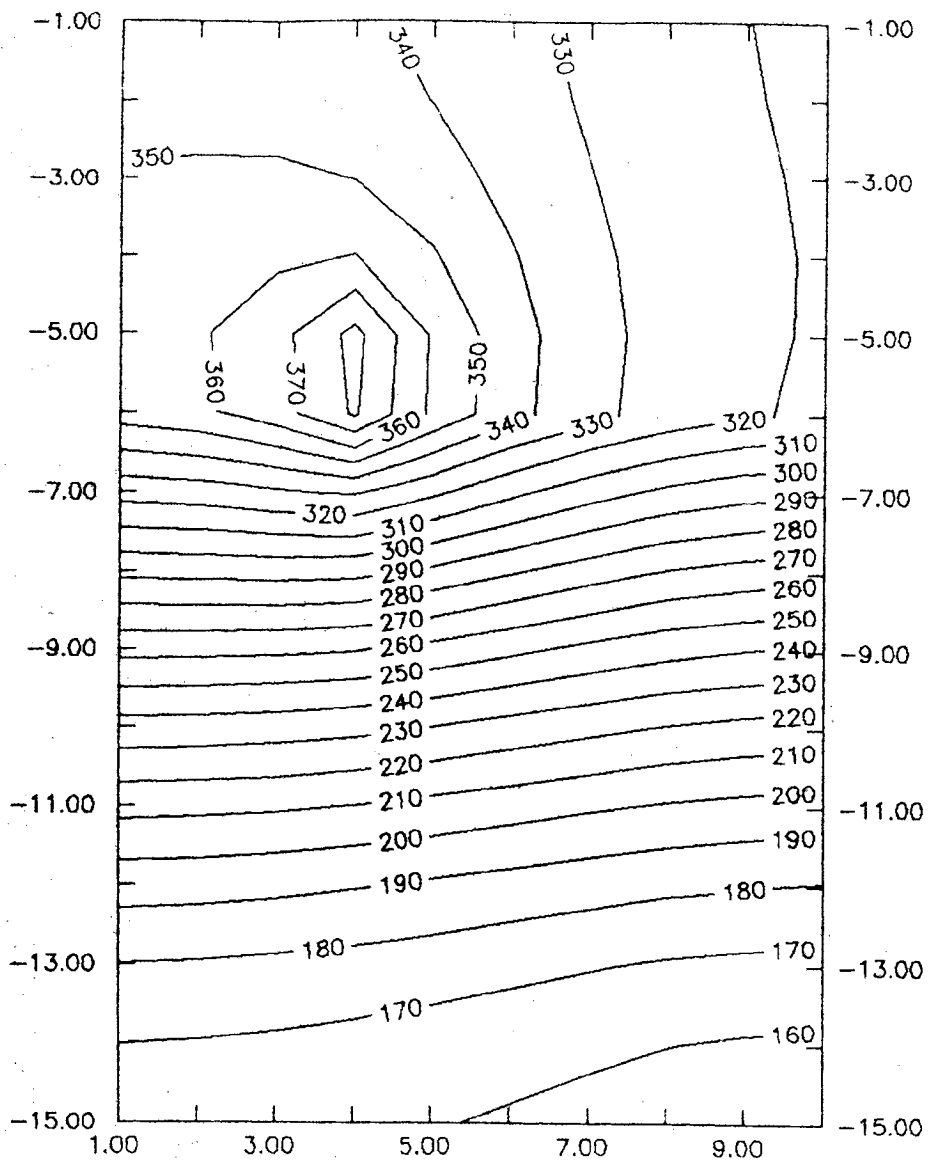


FIG. 8.- Simulación de la propagación de vapor de mercurio a partir de un foco puntual en un medio de porosidad elevada.

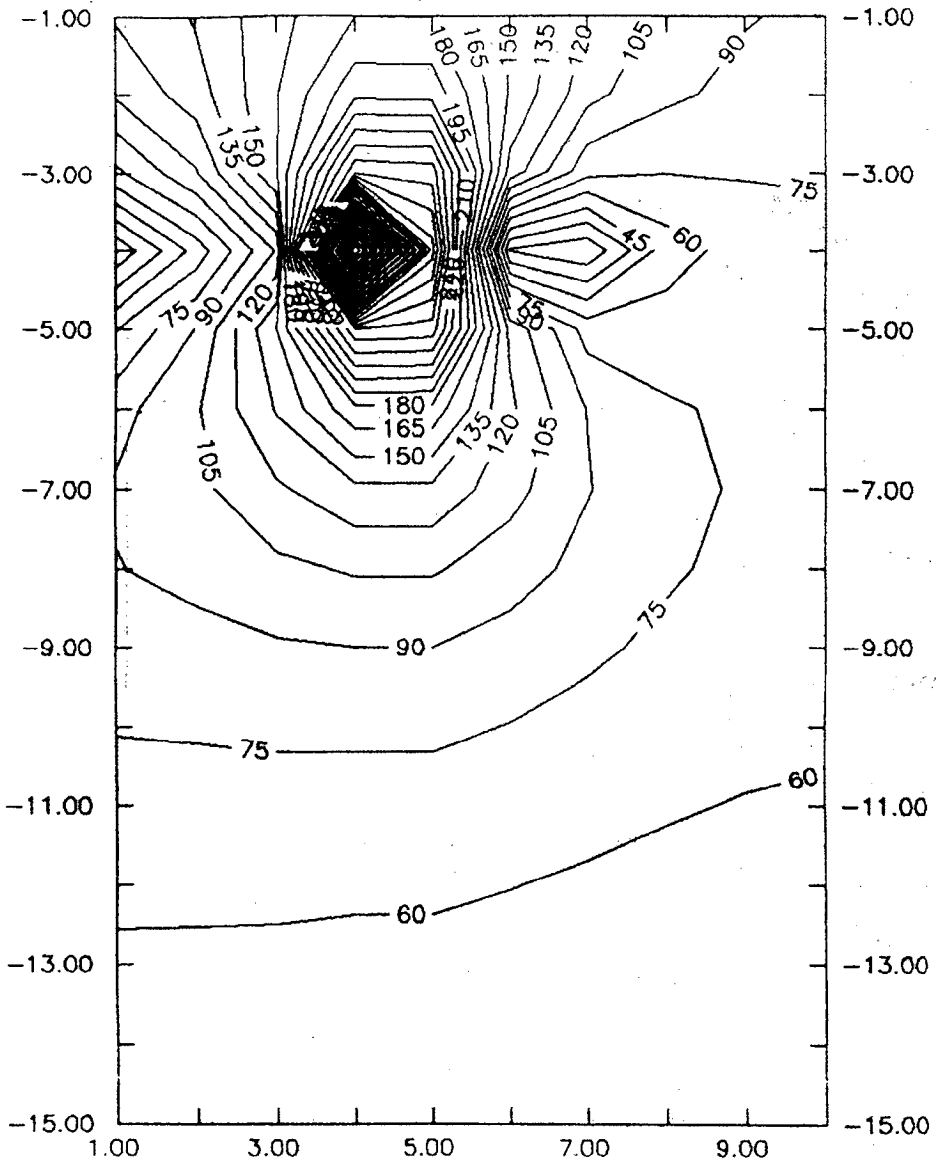


FIG. 9.- Simulación de la propagación de vapor de mercurio en un medio de baja porosidad y a partir de focos discretos de emisión.

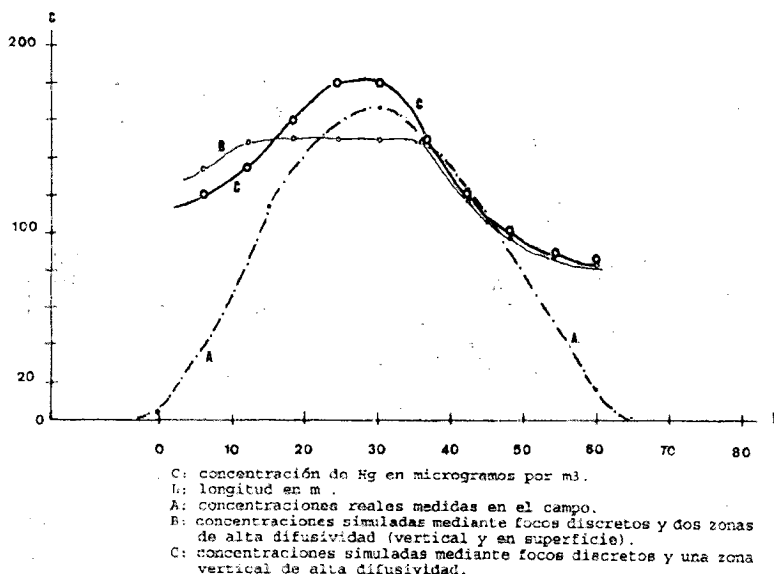


FIG. 10.- Concentraciones simuladas de vapor de mercurio y concentración observada en la zona sur del valle del Azogue.

## BIBLIOGRAFÍA

- FEDIKOW, M.A.F. y AMOR, S.D. (1990): «Evaluation of a mercury-vapour detection system in base- and precious-metal exploration, northern Manitoba». *Journal of Geochemical Exploration*, Vol.38, pp. 351-374.
- FURSOV, V.Z. (1990): «Mercury vapor surveys: technique and results». *Journal of Geochemical Exploration*, Vol.38, pp. 145-155.
- KOTHNY, E.L. (1973): «The Three-Phase Equilibrium of Mercury in Nature». In *Trace Elements in the Environment*. American Chemical Society, Washington. 149 pp.
- MASSMAN, J. y FARRIER, D.F. (1992): «Effects of atmospheric pressure on gas transport in the vadose zone». *Water Resources Research*. Vol. 28 (3), pp. 777-791.
- RUAN, T.; HALE, M. y HOWARTH, R.J. (1985): «Numerical Modelling Experiments in Vapour Geochemistry. II: Vapour Dispersion Patterns and Exploration Implications». *Journal of Geochemical Exploration*. Vol.23, pp. 265-280.
- SIMUNEK, J. y SUAREZ, D.L. (1993): «Modeling of Carbon Dioxide Transport and Production in Soil: 1. Model Development». *Water Resources Research*, Vol.29, N° 2, pp. 487-497.
- VILADEVALL, M.; FONT, X.; NAVARRO, A. y VIRTO, L. (1993): «La prospección atmogeoquímica mediante vapor de mercurio. Su aplicación al Valle del Azogue». *V Congreso de Geoquímica de España*. pp. 78-91.