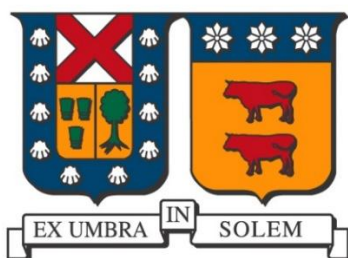


UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA  
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA DE MINAS, METALÚRGIA Y  
MATERIALES  
SANTIAGO - CHILE



# **MODELACIÓN HIDROGEOQUÍMICA DE LA REINYECCIÓN DE SALMUERAS RESIDUALES DE LITIO COMO ESTRATEGIA DE USO EFICIENTE DEL RECURSO HÍDRICO EN EL SALAR DE ATACAMA**

**RODRIGO OMAR RUBILAR CORTÉZ**

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO PROFESIONAL DE:

**INGENIERO CIVIL DE MINAS**

**PROFESORA GUÍA:**

DRA. BELÉN BARRAZA SANDOVAL

**PROFESOR CO-GUÍA:**

DR. MIGUEL LAGOS-ZUÑIGA

2025

# CONSTANCIA DE VALIDACIÓN Y CONFIDENCIALIDAD DE MONOGRAFÍA A REPOSITORIO ACADÉMICO

## 1.- IDENTIFICACIÓN DEL TRABAJO ACADÉMICO

**Tipo de monografía (marcar una opción):** ☒ Memoria o trabajo de título; ☐ Tesis de Postgrado;

**Título del trabajo:** Modelación hidrogeoquímica de la reinyección de salmueras residuales de litio como estrategia de uso eficiente del recurso hídrico en el Salar de Atacama.

**Nombre del candidato(a):** Rodrigo Omar Rubilar Cortéz

**Carrera / Grado:** Ingeniería Civil de Minas

**Campus:** San Joaquín; **Departamento:** Departamento de Ingeniería de Minas, Metalurgia y Materiales

## 2.- VALIDACIÓN DEL PROFESOR GUÍA/DIRECTOR DE TESIS

Yo, Belén Barraza, en mi calidad de profesor(a) guía/director(a) del trabajo académico mencionado anteriormente **DEJO CONSTANCIA** que:

- He revisado esta versión del documento y corresponde a la versión final aprobada del trabajo.
- El trabajo cumple con los requisitos académicos y de formato establecidos por la institución

## 3.- EVALUACIÓN DE CONFIDENCIALIDAD POR PROPIEDAD INDUSTRIAL

☒ El trabajo **NO contiene información que amerite confidencialidad** y puede ser publicado de inmediato en repositorio con acceso abierto.

☐ El trabajo **CONTIENE** información con potenciales implicancias de propiedad industrial o intelectual y requiere un periodo de confidencialidad (embargo) por:

☐ 6 meses; ☐ 12 meses; ☐ 2 años; ☐ 3 años; ☐ 5 años; ☐ 10 años

Fundamentación de la necesidad de confidencialidad (obligatorio si se solicita embargo):

## 4.- FIRMAS

**Profesor(a) guía o director(a) de memoria o tesis:**

**Fecha:** 13-10-2025

**; Firma:**



**Estudiante o Candidato(a):**

**Fecha:** 13-10-2025

**; Firma:**



# Resumen

La creciente demanda global de litio plantea desafíos relevantes en la sostenibilidad de los salares y la gestión del recurso hídrico en zonas áridas. Frente a esto, la Estrategia Nacional del Litio en Chile propone avanzar hacia tecnologías de extracción directa (DLE) más responsables, destacando la reinyección controlada de salmueras residuales como una medida de mitigación clave, reduciendo la dependencia de los estanques de evaporación.

Este estudio presenta un modelo hidrogeoquímico conceptual y numérico desarrollado con el software PHAST, herramienta de la *United States Geological Survey (USGS)* que acopla simulaciones de flujo subterráneo y transporte reactivo de especies químicas. El objetivo principal es evaluar la viabilidad y los efectos de la reinyección de salmueras agotadas en acuíferos profundos, empleando como caso de estudio el sistema lagunar de Tilopozo, en el sector suroriental del Salar de Atacama.

El modelo considera condiciones representativas del sistema, incluyendo evaporación, recarga meteórica y subterránea, así como la inyección forzada de salmueras industriales. Se incorpora el transporte reactivo de especies iónicas clave como  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ , junto con procesos de precipitación y disolución en equilibrio de minerales típicos de ambientes salinos (halita, yeso, calcita), además de reacciones de sorción e intercambio iónico.

Los resultados muestran que la reinyección de salmueras residuales modifica el gradiente hidráulico local, elevando el nivel freático en hasta 1.5 m con caudales de 15 L/s, e incluso invirtiendo flujos en sectores adyacentes a los pozos. Geoquímicamente, se evidencian cambios significativos en la concentración de litio (de 40 a  $>1000$  mg/L) y también, aumentos en el índice de saturación de halita (de  $-2.49$  a  $-0.83$ ) con la dolomita (de 0.03 a 1.32), indicando condiciones favorables para la precipitación mineral que podrían reducir la porosidad efectiva.

Estos resultados destacan la necesidad de un diseño cuidadoso de pozos y compatibilidad química entre el eluato y el acuífero receptor. El modelo desarrollado constituye una herramienta clave para evaluar escenarios de reinyección en términos de viabilidad técnica y riesgo geoquímico, aportando evidencia para una gestión más sostenible del litio en ambientes salinos complejos.

# Tabla de contenidos

|                                                                     |           |
|---------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>Glosario .....</b>                                               | <b>8</b>  |
| <b>1. Introducción.....</b>                                         | <b>10</b> |
| 1.2. HIPÓTESIS DE INVESTIGACIÓN .....                               | 13        |
| 1.3. OBJETIVO GENERAL.....                                          | 13        |
| 1.3.1. Objetivos específicos.....                                   | 13        |
| <b>2. Marco teórico .....</b>                                       | <b>15</b> |
| 2.1. SALARES Y SALMUERAS.....                                       | 15        |
| 2.1.1. Salar de Atacama: un recurso estratégico.....                | 16        |
| 2.1.2. Interfaz salina .....                                        | 18        |
| 2.1.3. Modelación numérica en salares.....                          | 20        |
| 2.1.4. Condiciones de borde en modelación numérica de salares ..... | 25        |
| 2.2. MÉTODO DE EXTRACCIÓN POR EVAPORACIÓN .....                     | 26        |
| 2.3. TECNOLOGÍAS DE EXTRACCIÓN DIRECTA DE LITIO .....               | 28        |
| 2.4. REINYECCIÓN DE SALMUERAS.....                                  | 30        |
| 2.4.1. Estado del arte .....                                        | 32        |
| 2.5. PHAST .....                                                    | 34        |
| 2.5.1. PHREEQC.....                                                 | 38        |
| 2.6. ESTABILIDAD NUMÉRICA EN MODELOS DE TRANSPORTE.....             | 41        |
| <b>3. Metodología.....</b>                                          | <b>43</b> |
| 3.1. ÁREA DE ESTUDIO.....                                           | 43        |
| 3.1.1. Marco geológico local .....                                  | 44        |
| 3.1.2. Estratigrafía .....                                          | 46        |
| 3.1.3. Hidrogeología .....                                          | 48        |
| 3.2. MODELO NUMÉRICO.....                                           | 49        |
| 3.2.1. Geometría y discretización del modelo.....                   | 51        |
| 3.2.2. Parámetros hidráulicos .....                                 | 53        |
| 3.2.3. Condiciones de borde.....                                    | 54        |
| 3.2.3.1. Recarga por precipitaciones .....                          | 56        |
| 3.2.3.2. Descarga por evaporación .....                             | 57        |
| 3.2.3.3. Recarga subterránea lateral.....                           | 58        |
| 3.2.3.4. Extracciones.....                                          | 59        |
| 3.2.3.5. Reinyección .....                                          | 60        |

|           |                                                              |           |
|-----------|--------------------------------------------------------------|-----------|
| 3.2.4.    | Condiciones iniciales y módulo químico .....                 | 60        |
| 3.3.      | ESCENARIOS DE SIMULACIÓN.....                                | 64        |
| 3.4.      | ALCANCES .....                                               | 65        |
| 3.5.      | SUPUESTOS Y LIMITACIONES.....                                | 66        |
| <b>4.</b> | <b>Resultados y discusiones .....</b>                        | <b>68</b> |
| 4.1.      | CASO BASE.....                                               | 68        |
| 4.2.      | CASO BASE CON TRANSPORTE DE SOLUTOS .....                    | 69        |
| 4.3.      | SIMULACIONES EN RÉGIMEN TRANSIENTE .....                     | 71        |
| 4.3.1.    | Simulaciones con extracción minera .....                     | 72        |
| 4.3.2.    | Simulaciones con reinyección sin transporte de solutos ..... | 73        |
| 4.3.3.    | Simulación de reinyección con transporte de solutos.....     | 76        |
| <b>5.</b> | <b>Conclusiones .....</b>                                    | <b>81</b> |
| 5.1.      | TRABAJOS FUTUROS .....                                       | 82        |
|           | <b>Referencias .....</b>                                     | <b>84</b> |

# Índice de figuras

|                                                                                                                                                                                                                                       |    |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1: RANKING DE LOS PAÍSES CON LA MAYOR CANTIDAD DE RESERVAS DE LITIO CON CHILE A LA CABEZA, SEGUIDO POR AUSTRALIA, ARGENTINA Y CHINA. ELABORACIÓN PROPIA EN BASE A DATOS DE LA USGS. ....                                            | 10 |
| 1.2: RANKING DE LA PRODUCCIÓN MUNDIAL DE LITIO EN EL AÑO 2023. ELABORACIÓN PROPIA EN BASE A DATOS DE COCHILCO.....                                                                                                                    | 11 |
| 2.1: UBICACIÓN DE LA CUENCA DEL SALAR DE ATACAMA CON SUS ZONAS DE INTERACCIÓN: NÚCLEO, ZONA MIXTA, ALUVIALES Y BASAMENTO. ADAPTADO DE MARAZUELA ET AL. 2019A.....                                                                     | 17 |
| 2.2: ESQUEMA DE LAS ZONAS DE INTERACCIÓN EN EL SALAR DE ATACAMA. ADAPTADO DE MARAZUELA ET AL. (2019A). ....                                                                                                                           | 18 |
| 2.3: REPRESENTACIÓN GRÁFICA DE LOS RESULTADOS DEL ESTUDIO DE HOLZBECHER (2005) A UN NÚMERO DE RAYLEIGH DE 400. LA REGIÓN OSCURA INDICA ALTA SALINIDAD Y LA REGIÓN CLARA, SALINIDAD BAJA. LAS FLECHAS LA DIRECCIÓN DE LOS FLUJOS. .... | 22 |
| 2.4: RESULTADO DEL ESTUDIO DE VÁSQUEZ ET AL. (2013) DONDE SE MUESTRA LA DISTRIBUCIÓN ESPACIAL DE LA HALITA CON SU RESPECTIVA CONCENTRACIÓN. LAS LÍNEAS NEGRAS MUESTRAN LA DIRECCIÓN DEL FLUJO. ....                                   | 22 |
| 2.5: DOMINIO DEL MODELO DESARROLLADO POR HAMANN ET AL. (2015) JUNTO CON LAS CONDICIONES DE BORDE. LA MAYORÍA DE LOS MODELOS REALIZADOS EN ESOS AÑOS RESPONDÍAN A LAS MISMAS DIMENSIONES Y FLUJOS. ....                                | 23 |
| 2.6: MAPAS DE CONTORNO DEL NIVEL FREÁTICO RESULTANTES DEL MODELO NUMÉRICO DESARROLLADO POR MARAZUELA EN 2019. FUENTE: MARAZUELA ET AL. 2019B..                                                                                        | 25 |
| 2.7: REPRESENTACIÓN ESQUEMÁTICA DEL MÉTODO EVAPORÍTICO. EN VARIOS DE ESTOS PASOS SE USA AGUA DULCE Y DIFERENTES PRODUCTOS QUÍMICOS PARA LA EXTRACCIÓN DEL LITIO. MODIFICADO DE FLEXER ET AL., 2018. ....                              | 27 |
| 2.8: PROCESO DLE GENERAL APLICADO A LAS SALMUERAS. ELABORACIÓN PROPIA. ....                                                                                                                                                           | 29 |
| 2.9: REPRESENTACIÓN ESQUEMÁTICA DE LA EXTRACCIÓN DIRECTA DE LITIO CON REINYECCIÓN A LOS ACUÍFEROS. MODIFICADO DE FLEXER ET AL., 2018.....                                                                                             | 31 |
| 2.10: RESULTADO DEL ESTUDIO DE LEONARD ZOUREK (2020) DONDE MUESTRA EL CAMBIO EN EL NIVEL FREÁTICO A DIFERENTES TASAS DE REINYECCIÓN. ....                                                                                             | 33 |
| 2.11: ESQUEMA DEL FUNCIONAMIENTO DE PHAST Y LA RELACIÓN ENTRE LOS INPUTS Y LOS OUTPUTS. MODIFICADO DE CHARLTON, KIPP, & PARKHURST, 2011. ....                                                                                         | 38 |
| 3.1: DETALLE DE LA UBICACIÓN Y PRINCIPALES COMPONENTES DEL SECTOR VEGAS DE TILOPOZO. ADAPTADO DE SQM, 2021. ....                                                                                                                      | 44 |
| 3.2: UNIDADES GEOMORFOLÓGICAS DEL SECTOR DE TILOPOZO: FUENTE: SQM, 2021A.                                                                                                                                                             | 45 |
| 3.3: UBICACIÓN DE LOS SONDAJES Y LA ESTRATIGRAFÍA DE CINCO DE ELLOS. ELABORADO CON DATOS DE SQM, 2021A. ....                                                                                                                          | 46 |

|                                                                                                                                                                                                |                                      |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------|
| 3.4: PERFIL ESTRATIGRÁFICO TÍPICO DEL NÚCLEO Y MÁRGENES DEL SALAR. MODIFICADO DE MARAZUELA ET AL. (2019A) .....                                                                                | 47                                   |
| 3.5: UBICACIÓN CONCEPTUAL DEL MODELO NUMÉRICO. LOS PUNTOS AL BORDE DEL NÚCLEO REPRESENTAN LOS POZOS DE REINYECCIÓN. ADAPTADO DE SQM, 2021A.....                                                | 50                                   |
| 3.6: ESQUEMA REPRESENTATIVO DEL MODELO NUMÉRICO CON SUS DIMENSIONES, UNIDADES HIDROGEOLÓGICAS Y LOS POZOS DE EXTRACCIÓN Y REINYECCIÓN. ....                                                    | 52                                   |
| 3.7: PROPIEDADES HIDRÁULICAS UTILIZADAS EN EL MODELO TRIDIMENSIONAL. DL Y DT SON DISPERSIVIDADES LONGITUDINAL Y TRANSVERSAL RESPECTIVAMENTE. ....                                              | 54                                   |
| 3.8: ESQUEMA REPRESENTATIVO DE LAS CONDICIONES DE BORDE IMPUESTAS EN EL MODELO NUMÉRICO. ....                                                                                                  | 55                                   |
| 3.9: DISTRIBUCIÓN DE PRECIPITACIÓN PROMEDIO ANUAL PARA LA CUENCA DEL SALAR DE ATACAMA. FUENTE: SQM, 2021A. ....                                                                                | 56                                   |
| 3.10: RELACIÓN EXPONENCIAL ENTRE LA EVAPORACIÓN Y LA PROFUNDIDAD DEL NIVEL FREÁTICO CON LOS VALORES DE AJUSTE DE MARAZUELA. MODIFICADO DE ZOUREK, 2020. ....                                   | 57                                   |
| 3.11: REPRESENTACIÓN ESQUEMÁTICA DEL FUNCIONAMIENTO DE LA EVAPORACIÓN POR PUNTOS EN PHAST. ....                                                                                                | 58                                   |
| 3.12: UBICACIÓN CONCEPTUAL DE LOS ACUÍFEROS EN EL MODELO TRIDIMENSIONAL. ELABORACIÓN PROPIA. ....                                                                                              | <b>¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.</b> |
| 3.13: DIAGRAMA SECUENCIAL DE LOS ESCENARIOS DE SIMULACIÓN IMPLEMENTADOS. ...                                                                                                                   | 65                                   |
| 4.1: VISTA DEL NIVEL FREÁTICO EN TODO EL MODELO EN RÉGIMEN ESTACIONARIO. ....                                                                                                                  | 68                                   |
| 4.2: CONCENTRACIÓN DE LITIO EN MG/L I. AL INICIO DE LA SIMULACIÓN II. AL FINAL DEL ÚLTIMO PASO DE TIEMPO. ....                                                                                 | 70                                   |
| 4.3: NIVEL FREÁTICO DEL MODELO NUMÉRICO PARA LA SIMULACIÓN EN RÉGIMEN TRANSIENTE Y CON ACTIVIDAD DE EXTRACCIÓN DE SALMUERA EN EL NÚCLEO.....                                                   | 72                                   |
| 4.4: SECCIÓN TRANSVERSAL DE LA ELEVACIÓN DEL NIVEL FREÁTICO PARA DIFERENTES TASAS DE REINYECCIÓN. LA LÍNEA VERTICAL SEGMENTADA REPRESENTA EL LÍMITE ENTRE EL NÚCLEO Y LA INTERFAZ SALINA. .... | 74                                   |
| 4.5: SIMULACIÓN CON REINYECCIÓN DE SALMUERA A UN CAUDAL DE 5 L/S POR POZO. LAS LÍNEAS NEGRAS EXAGERADAS MUESTRAN LAS DIRECCIONES DE LOS FLUJOS. ....                                           | <b>¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.</b> |
| 4.6: SIMULACIÓN CON REINYECCIÓN DE SALMUERA A UN CAUDAL DE 15 L/S POR POZO. ....                                                                                                               | <b>¡ERROR! MARCADOR NO DEFINIDO.</b> |
| 4.7: NIVEL FREÁTICO DEL SISTEMA A UN CAUDAL DE INGRESO DE 17 L/S POR POZO.....                                                                                                                 | 76                                   |
| 4.8: CONCENTRACIÓN DE LITIO EN MG/L EN EL ACUÍFERO BAJO REINYECCIÓN. CASO DE 5 L/S. ....                                                                                                       | 77                                   |
| 4.9: CONCENTRACIÓN DE LITIO EN MG/L EN EL ACUÍFERO BAJO REINYECCIÓN. CASO DE 10 L/S. ....                                                                                                      | 77                                   |
| 4.10: ÍNDICE DE SATURACIÓN DE LA HALITA. CASO DE 10 L/S.....                                                                                                                                   | 78                                   |
| 4.11: ÍNDICE DE SATURACIÓN DE LA DOLOMITA. CASO DE 10 L/S.....                                                                                                                                 | 79                                   |

# Glosario

**Actividad antrópica o antropogénica:** Cualquier acción o intervención realizada por los seres humanos que tiene un impacto en el medio ambiente o en otros aspectos del entorno.

**Acuífero:** Formación geológica subterránea, compuesta por rocas o sedimentos, que permite la circulación y almacenamiento de agua subterránea.

**Adsorción:** Proceso físico o químico en el que átomos, iones o moléculas de una sustancia se adhieren a la superficie de otra.

**Conductividad hidráulica:** Medida de facilidad con la que un fluido puede moverse a través de un medio poroso.

**Cuenca endorreica:** Cuenca hidrográfica en la que las aguas de recarga no fluyen hacia el océano.

**Cuenca hidrográfica:** Terreno continental donde toda la escorrentía superficial fluye hacia un punto en común a través de una red de drenaje.

**Dilución:** Proceso de reducir la concentración de una sustancia determinada al agregar un solvente.

**Intercambio iónico:** Proceso reversible donde iones de igual carga son intercambiados entre una solución y un sólido.

**Lisímetro:** Recipiente cerrado que se llena con suelo y vegetación, utilizado para medir la pérdida de agua por evapotranspiración.

**Nivel freático:** Superficie superior de la zona de saturación en un medio poroso donde la presión del agua subterránea es igual a la presión atmosférica.

**Precipitación química:** Proceso en el cual una sustancia soluble se convierte en un sólido precipitado en una solución líquida.

**Porosidad:** Razón entre el volumen de vacíos y el volumen total que ocupa un medio granular.

**Salar:** Depósitos salinos desarrollados en cuencas hidrográficas endorreicas, con una evaporación mayor que la escorrentía.

**Salmuera:** Solución de agua con alta concentración de sales disueltas, generalmente cloruro de sodio (NaCl).

# 1. Introducción

El litio es un elemento esencial en la transición hacia una energía más limpia debido a su uso en baterías recargables para vehículos eléctricos y en sistemas de almacenamiento de energía renovable [1]. La creciente demanda de este metal ha generado una expansión significativa en su producción, pasando de cerca de 200 kilotoneladas (kt) de *LCE* (carbonato de litio equivalente por sus siglas en inglés) en el año 2016, a 983 kt en 2023, con una proyección de 1404 kt de demanda para el año 2025 [2]. En particular, Chile se encuentra en una posición privilegiada, pues posee aproximadamente un 33,6% de las reservas mundiales de este mineral (*Figura 1.1*), con 9300 kilotoneladas estimadas, convirtiéndolo en el país con el mayor porcentaje de reservas en el mundo [3].

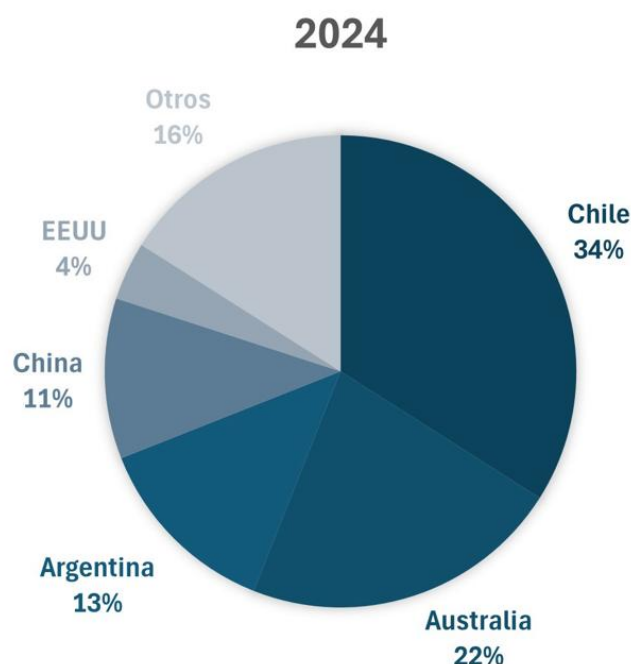


**Figura 1.1:** Ranking de los países con la mayor cantidad de reservas de litio con Chile a la cabeza, seguido por Australia, Argentina y China. Elaboración propia en base a datos de la USGS.

Bajo la misma línea, Chile actualmente ostenta el segundo lugar entre los países productores de litio (*Figura 1.2*), con aproximadamente 250 kt de *LCE* producidas para el año 2023, abarcando el 27% de la producción mundial para ese año [2].

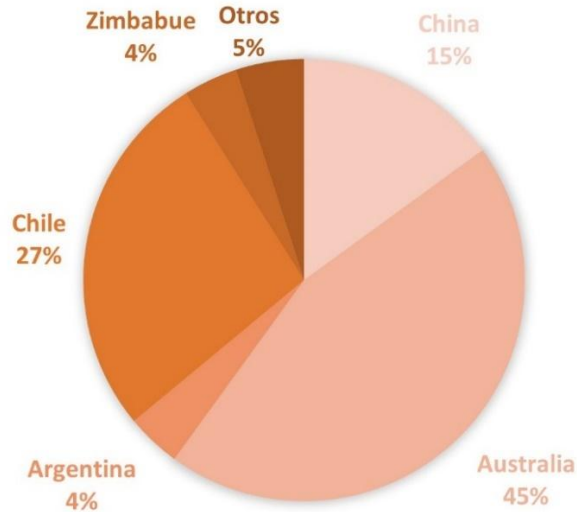


**Figura 1.2:** Ranking de la producción mundial de litio en el año 2023. Elaboración propia en base a datos de COCHILCO.

Actualmente, la extracción de litio proviene exclusivamente de minerales de roca dura y salmueras continentales, siendo esta última las reservas dominantes, abarcando más del 60% de la distribución total de litio, con importantes depósitos identificados en el llamado “Triángulo del litio” de Sudamérica que incluye a Bolivia, Argentina y Chile [4][5]. En el caso chileno, el Salar de Atacama destaca como el tercer salar más extenso del mundo y la principal fuente de litio a nivel global [3]. Su salmuera se beneficia directamente de las condiciones climáticas de la región, es decir, una rápida evaporación y precipitaciones anuales extremadamente bajas, lo que lo convierte en el sitio ideal para la producción de *LCE*.

El método evaporítico, utilizado actualmente para extraer el litio de los depósitos de salmueras continentales, se basa en la evaporación al aire libre para concentrarla. El principal propósito del proceso es obtener una salmuera concentrada libre de otros iones como sodio, calcio, potasio y magnesio. Si bien goza de varias ventajas como la baja inversión y el alto margen de ganancias que se puede alcanzar, también supone grandes desventajas como la lentitud del proceso, que va desde los 10 hasta los 24 meses de evaporación, y la enorme pérdida de agua, en donde se estima que hasta el 95% del recurso hídrico se derrocha en el proceso [6].

En respuesta a esto, el Gobierno de Gabriel Boric, en el año 2023, presentó la Estrategia Nacional del Litio (*ENL*) que comprende “un conjunto de medidas

que buscan incorporar capital, tecnología, sostenibilidad y agregación de valor al sector productivo del litio, en armonía con las comunidades”. La estrategia define como fundamental el aumento del potencial productivo del país, asegurando la máxima recuperación posible del recurso y minimizando el impacto ambiental de la industria. Para lograr estos objetivos se propone invertir en capacidades productivas, atraer nuevos actores al sector e introducir nuevas técnicas de extracción [7].

Las tecnologías de extracción directa de litio (*DLE* por sus siglas en inglés: *Direct Lithium Extraction*) han surgido como una alternativa prometedora que captan el litio de la salmuera natural sin necesidad de estanques de evaporación ni de precipitar sales con una cantidad considerable de impurezas [8]. Ofrece numerosas ventajas, como la independencia del clima, la capacidad de crear rápidamente un concentrado de alta pureza y la posibilidad de procesar salmueras con menor contenido de litio [9]. La mayoría de los participantes de la industria esperan que se adopten estas tecnologías, no obstante, su implementación genera un nuevo desafío técnico: la gestión de grandes volúmenes de salmueras agotadas en litio, que podrían alterar el balance hídrico del acuífero si no se manejan adecuadamente.

A partir de esta situación es que aparece el concepto de *reinyección*, el cual consiste en devolver bajo presión al acuífero las salmueras residuales del proceso *DLE* a emplear. Con esto se busca mitigar los impactos ambientales como la alteración del balance hídrico de los acuíferos, la estabilidad geológica adherida al riesgo de subsidencia y la conservación de la flora y fauna nativa de los salares [9]. Sin embargo, aunque la reinyección es reconocida como una solución técnica a nivel conceptual, no existe actualmente una metodología validada para su implementación en salares. Tampoco se dispone de estudios concluyentes que demuestren su viabilidad hidrogeológica, geoquímica o ambiental en condiciones reales de operación.

Para avanzar en la comprensión de este problema, el presente trabajo propone un estudio de caso aplicado al sistema lagunar de Tilopozo, ubicado al sureste del núcleo del Salar de Atacama. Esta elección se fundamenta en tres razones principales: es el tercer salar más grande en la tierra, con una extensión aproximada de 3100 km<sup>2</sup>; contiene ecosistemas excepcionales y zonas de anidación de aves en la zona de mezcla superficial, que requieren soluciones científicas para su conservación y sostenibilidad; y el sistema junto con la cuenca que lo contiene han sido ampliamente estudiados, tanto por

organismos públicos como privados, por lo que se cuenta con una gran cantidad de antecedentes de acceso público [11].

El trabajo busca evaluar, mediante modelación numérica, la factibilidad hidrogeológica de un escenario de reinyección de salmueras tratadas en el sistema Tilopozo, cuantificando su efecto sobre el balance hídrico, el nivel freático, los patrones químicos y el potencial impacto ambiental en la zona de mezcla superficial. Para ello se utilizará el software PHAST [41], software de la *United States Geological Survey* diseñado para simular el flujo subterráneo de agua, acoplado con PHREEQC [46] permitiendo así la simulación del transporte de especies químicas. Los resultados de este estudio podrían sentar las bases técnicas para diseñar e implementar estrategias de reinyección sustentables en salares de alta sensibilidad ambiental.

## **1.2. Hipótesis de investigación**

El estudio de estrategias de reinyección de salmueras residuales tratadas, evaluadas mediante modelación numérica, permite comprobar su viabilidad hidrogeológica para mantener el balance hídrico del sistema Tilopozo, reduciendo la afectación del nivel freático y de los ecosistemas asociados, sin comprometer la eficiencia de los procesos de extracción directa de litio.

## **1.3. Objetivo general**

Evaluar la factibilidad hidrogeológica y ambiental de la reinyección controlada de salmueras residuales provenientes de procesos de extracción directa de litio en el sistema Tilopozo del Salar de Atacama, mediante modelación y simulación numérica de flujo subterráneo y transporte de solutos.

### **1.3.1. Objetivos específicos**

1. Diseñar un modelo hidrogeoquímico computacional para representar la dinámica de mezcla entre las salmueras residuales y los acuíferos receptores en la reinyección.

2. Evaluar los efectos de la reinyección en el equilibrio fisicoquímico de los acuíferos: determinar los principales cambios en la composición, saturación de minerales, dilución de los elementos de interés y potencial de precipitación de sales claves en la reinyección.
3. Analizar la viabilidad ambiental e hidrológica de la reinyección como herramienta de mitigación de impactos en la extracción de litio, considerando sus beneficios y riesgos para la sostenibilidad del recurso y así proponer condiciones de operación óptimas.

## 2.Marco teórico

### 2.1. Salares y salmueras

Los **salares** son depósitos salinos que se desarrollan en cuencas hidrográficas endorreicas, es decir, sistemas cerrados donde no existe escurrimiento superficial hacia el océano. En estos entornos, característicos de zonas áridas, semiáridas o desérticas, la evaporación supera ampliamente a la precipitación, lo que favorece la acumulación progresiva de sales disueltas. Los salares están conformados por capas de minerales evaporíticos, tales como halita, yeso, calcita, y en algunos casos, presentan una costra salina superficial [12].

Bajo esta costra, dependiendo de la profundidad y la estructura del depósito, se encuentran cuerpos de agua subterránea altamente salinos, conocidos como **salmueras**. Estas salmueras resultan de la disolución de minerales evaporíticos y la concentración sostenida de solutos debido al intenso proceso de evaporación. Suelen contener elementos de alto valor económico como el litio, boro, potasio y magnesio, además de grandes concentraciones de sodio y calcio [13]. La composición química de las salmueras varía de un salar a otro, en función de su origen geológico, el tipo de rocas fuente, las condiciones hidrogeológicas y climáticas particulares.

Una región clave a nivel global para este tipo de depósitos es el llamado **Triángulo del Litio**, que abarca sectores del norte de Chile, noroeste de Argentina y suroeste de Bolivia. Esta zona concentra más del 50% de los recursos de litio en salmueras del planeta, alojados en salares como Atacama, Hombre Muerto y Uyuni, entre otros [4][5][14]. La combinación de climas hiperáridos, geología favorable y cuencas endorreicas cerradas ha convertido a estos salares en el epicentro de la minería de litio a nivel mundial.

En el norte de Chile se pueden diferenciar dos tipos de salares, que responden a la cantidad de precipitaciones al año y la tasa de evaporación que varían en función de la altura y profundidad del nivel freático [15]. Se tienen los **Salares de la costa y valle central**, integrados por salares inactivos, fósiles y costras de sales muy secas. Acá se encuentran los depósitos de nitrato y yodo. El segundo tipo se denominan **Salares de la Cordillera de los Andes**, donde la mayoría son salares activos, al recibir aportes de agua de su

cuenca de drenaje concentradas por evaporación en lagunas superficiales donde precipitan las sales. Dentro de estos últimos se distinguen dos subtipos: salares activos **tipo costra** y **tipo playa**. Los tipo playa se constituyen de sedimentos salinos finos y casi impermeables sobre los cuales se extienden lagunas someras de área muy variable, ubicados generalmente en el altiplano o alta cordillera. Los tipo costra son capas de sales porosas y permeables con sales intersticiales en contraste a las costras secas del valle central, compuestos de halita o de yeso, ubicados en la precordillera a alturas inferiores a los 3500 m.s.n.m., por ejemplo, el Salar de Atacama.

### **2.1.1. Salar de Atacama: un recurso estratégico**

El Salar de Atacama se emplaza en una gran cuenca endorreica ubicada en la Región de Antofagasta, en el norte de Chile, aproximadamente a 150 kilómetros al sureste de la ciudad de Calama, dentro de los límites de la comuna de San Pedro de Atacama. Esta cuenca presenta una forma ovalada, con su eje mayor orientado en dirección norte-sur, y una superficie aproximada de 17000 km<sup>2</sup>. Limita al oeste con la Cordillera de la Sal, y al norte, este y sur con la Cordillera de los Andes. La parte más baja de la cuenca corresponde al núcleo del salar y su zona mixta o de transición, localizada a una altitud aproximada de 2300 m.s.n.m. Esta área presenta dimensiones de 100 km de largo por 80 km de ancho, abarcando cerca de 3100 km<sup>2</sup> [16].

Desde el depocentro hacia los bordes de la cuenca, se pueden distinguir cuatro zonas geomorfológicas (*Figura 2.1* y *Figura 2.2*):

- 1. Núcleo del salar**
- 2. Zona mixta o de mezcla**
- 3. Zona de abanicos aluviales**
- 4. Rocas volcánicas y basamento**

El núcleo constituye un cuerpo salino homogéneo, compuesto principalmente por costras duras de halita. Su topografía es altamente irregular debido a la constante evaporación y la presencia estacional de aguas superficiales efímeras [16]. La zona mixta o de transición contiene capas intercaladas de calcita, yeso y halita [17]. En tanto, los abanicos aluviales y las rocas volcánicas del basamento se ubican a mayor altitud y conforman las principales zonas de recarga del acuífero.

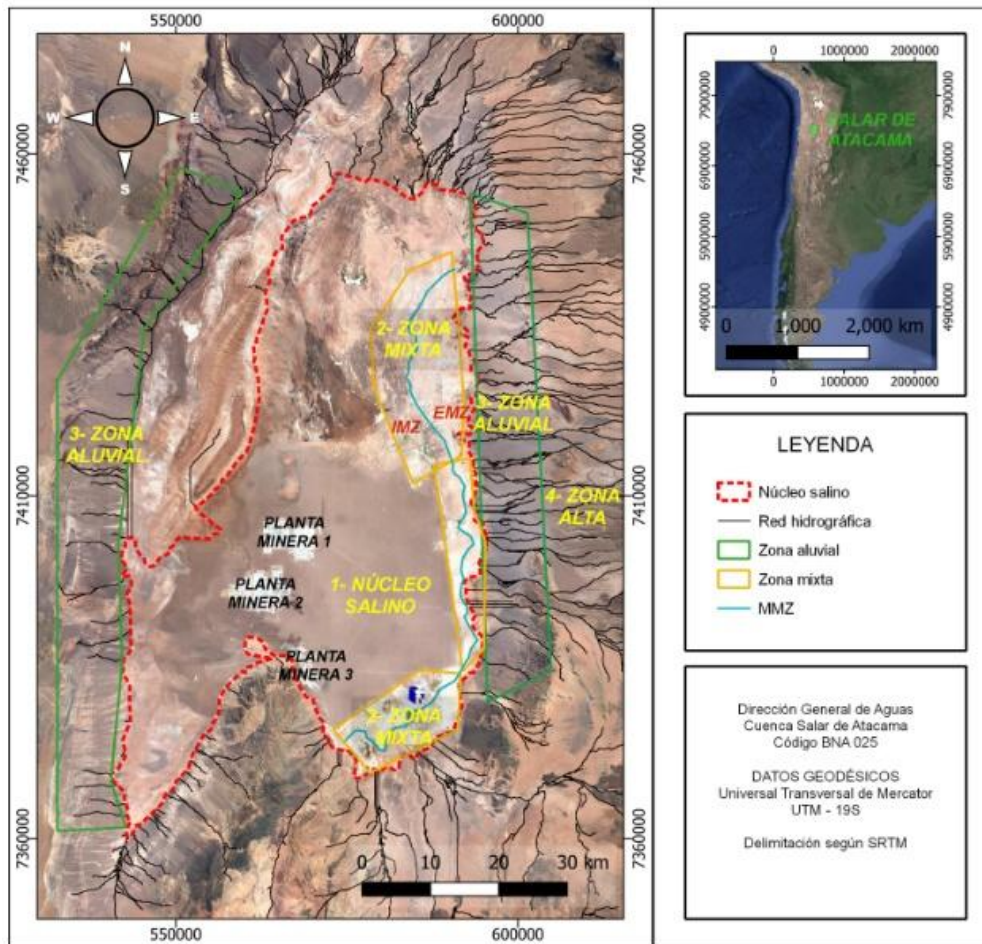


**Figura 2.1:** Ubicación de la cuenca del Salar de Atacama con sus zonas de interacción: núcleo, zona mixta, aluviales y basamento. Adaptado de Marazuela et al. 2019a.

La red hidrográfica es dispersa y discontinua, compuesta por algunos ríos, arroyos, lagunas y lagos; muchos de estos se concentran en la zona de mezcla. Los principales afluentes son los ríos San Pedro y Vilama, que se originan al norte de la cuenca y fluyen hacia el sur. Los lagos se agrupan en cuatro sistemas de interés: sistema Soncor, al noreste de la cuenca, que se alimenta del canal Burro Muerto, Aguas de Quelana en el borde este, Peine y Tilopozo, ambos sistemas contiguos en la parte sureste de la zona. Además, se pueden distinguir los lagos Tebinquiche y Cejar en la parte norte del abanico aluvial de San Pedro [16].

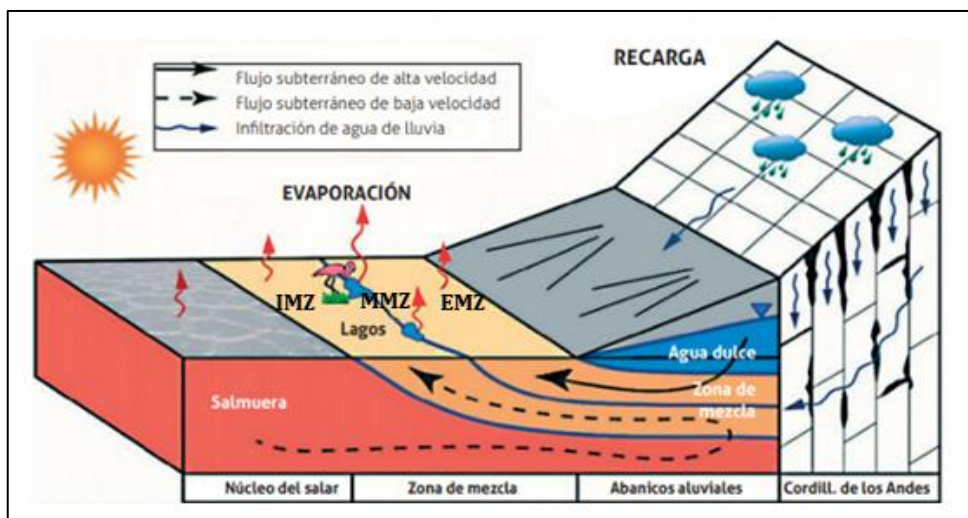


**Figura 2.2:** Esquema de las zonas de interacción en el Salar de Atacama. Adaptado de Marazuela et al. (2019a).

Debido a que la Cordillera de los Andes actúa como una barrera geográfica para el movimiento atmosférico, la zona es caracterizada por un clima hiperárido, lo que resulta en precipitaciones extremadamente bajas que rondan, en promedio, unos 20 mm/año. La mayor fuente de agua proviene de la alimentación subterránea desde la cordillera y los abanicos aluviales. En estas zonas de altas montañas las precipitaciones alcanzan hasta 160 mm/año, principalmente a partir de alturas superiores a los 5000 m.s.n.m. donde los volcanes están generalmente cubiertos de nieve [18].

La principal descarga de la cuenca está dada por la evaporación freática en la zona marginal y, de forma minoritaria, en el núcleo. En la zona marginal, donde el nivel freático se encuentra más cercano a la superficie o directamente sobre el en los lagos y humedales alimentados por los flujos ascendentes, las tasas de evaporación alcanzan valores de hasta 5,84 mm/d [19]. Además, a pesar de que el acuífero se encuentra a mayor profundidad en el núcleo, este también contribuye ligeramente a la descarga en la cuenca, con tasas de evaporación cercano a 0,05 mm/d. Estas tasas van decreciendo hasta llegar un punto en donde se hace nula, típicamente los 2 metros de profundidad [20].

### 2.1.2. Interfaz salina

Uno de los elementos clave para entender el funcionamiento hidrogeológico del Salar de Atacama es la presencia de una cuña o interfaz salina en todos los

márgenes del salar (lo que anteriormente se denomina zona mixta). Esta pertenece a la zona de transición en donde agua dulce proveniente de la recarga subterránea entra en contacto con salmuera altamente concentrada. Dicha interfaz rodea todo el núcleo, especialmente donde las aguas subterráneas recargadas en las zonas altas y cordones montañosos ingresan al sistema salino del núcleo del salar.

Las principales características que definen este sector son:

- **Diferencia de densidades:** El contraste de densidad entre el agua dulce (cercano a  $1 \text{ kg/m}^3$ ) y la salmuera (hasta los  $1,23 \text{ kg/m}^3$ ) genera una estructura de flujo tipo *cuña salina*, similar a lo que se observa en intrusiones marinas [21], es decir, el agua dulce tiende a flotar sobre la salmuera hiper salina y se infiltra lateralmente hacia el núcleo por gradientes de presión hidráulica.
- **Interacciones hidrogeoquímicas:** La interfaz no es un límite pasivo, allí ocurren reacciones químicas intensas como la precipitación de calcita ( $\text{CaCO}_3$ ), dolomita ( $[\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2]$ ) y yeso ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ) por cambios en el equilibrio químico al mezclarse aguas de distinta composición iónica. Existe, además, zonas de cementación por acumulación de minerales, que disminuyen la porosidad y alteran la permeabilidad [17].
- **Variabilidad espacial y vertical:** La forma y extensión de la zona dependen del gradiente hidráulico desde las zonas de recarga hacia el núcleo, la heterogeneidad del medio poroso, que puede canalizar o frenar la penetración de agua dulce y también del grado de evaporación superficial. Es por esta razón que existen lugares en donde la interfaz salina tiene una extensión de hasta 10 kilómetros, principalmente en los bordes este de la cuenca, mientras que en el borde oeste hay sectores en donde es casi inexistente [22].

Se pueden diferenciar tres zonas dentro de la interfaz en función de sus características hidráulicas [16][22] (véase *Figura 2.2*): La **zona interna de mezcla (IMZ)**, en contacto directo con el núcleo del salar. Acá predominan flujos de salmuera ascendentes que son expulsados hacia las lagunas como Burro Muerto o Soncor. Es una zona de flujo convectivo inducido por las gradientes de densidades. La **zona media de mezcla (MMZ)**, en donde el agua dulce proveniente de los acuíferos de montaña sube por flotabilidad hasta alcanzar niveles más superficiales, dando lugar a los cuerpos lagunares de Quelana, Peine y Tilopozo. Acá también se ubican algunas lagunas

marginales y humedales, de gran importancia para el ecosistema, generando además que todas las especies endémicas del sector ocupen este sector dando origen por ejemplo a la Reserva Nacional Los Flamencos. Por último, la **zona externa de mezcla (EMZ)**, la zona de transición entre la interfaz salina y los abanicos aluviales. Aquí el flujo subterráneo comienza a cambiar de dulce a salino, de gradiente horizontal y de menor velocidad.

La interfaz salina cumple un rol fundamental en el equilibrio hidrogeológico del salar. Actúa como una barrera parcial, impidiendo que la salmuera del núcleo se desplace fácilmente hacia los bordes del sistema, y, a su vez, limita la penetración del agua dulce hacia el interior [23]. Esto permite preservar la hipersalinidad del núcleo y proteger los sistemas marginales más sensibles. Además, representa una zona de alta sensibilidad ecológica y es crítica para la disponibilidad de agua subterránea en las lagunas marginales, muchas de las cuales dependen del equilibrio de esta interfaz. Su alteración, ya sea por extracciones intensivas o cambios en el balance hídrico, puede provocar intrusión salina en acuíferos más dulces, desecación de cuerpos lagunares y la correspondiente pérdida de biodiversidad.

### **2.1.3. Modelación numérica en el Salar de Atacama**

El estudio del Salar de Atacama técnicamente se remonta a los tiempos en donde se inicia la extracción minera, en el año 1984, con el fin de comprender todo el complejo sistema que comprende la cuenca. Uno de los trabajos fundacionales en la caracterización científica del sector fue el realizado por Luis Mardones en el año 1986 titulado “***Características geológicas e hidrogeológicas del Salar de Atacama***”. El trabajo tenía por objetivo describir la configuración geológica e hidrogeológica del salar, abordando tanto sus componentes litológicos como la dinámica del agua subterránea, para sustentar así el potencial del salar como fuente de recursos evaporíticos [24]. Este sentó las bases de lo que sería más adelante la modelación numérica en entornos similares. El estudio proponía una primera zonificación hidrogeológica, distinguiendo entre zonas de recarga, la zona de mezcla y el núcleo del salar.

En las últimas dos décadas, diversos estudios han contribuido al desarrollo de modelos que integran tanto el flujo subterráneo como el transporte de solutos en sistemas salinos, permitiendo comprender de manera más precisa

la dinámica hidrogeoquímica de acuíferos en los salares. Uno de los primeros esfuerzos fue realizado por Tejeda et al. en 2003, quienes desarrollaron un modelo bidimensional de flujo en condiciones de densidad variable para simular la intrusión salina en el Salar de Atacama [25]. Este modelo permitió reproducir la interfaz entre agua dulce y salmuera, resaltando el rol de la evaporación como amortiguador del sistema, en donde los mayores valores se daban en la zona de mezcla. Posteriormente, Muñoz-Pardo et al. (2004), usando MODFLOW, propusieron una conceptualización detallada del funcionamiento hidrogeológico del acuífero del núcleo del salar, integrando datos de campo y simulaciones para definir zonas de flujo y recarga [26]. Los autores nuevamente proponían una división funcional del sistema, reafirmando la importancia del estudio realizado por Mardones, además, por primera vez se destacaba la importancia de la intervención antropogénica en el lugar, dando a entender que cualquier intervención en el sistema puede alterar los flujos de recarga, provocar intrusión salina inversa y afectar la estabilidad de lagunas y humedales.

De forma complementaria, Holzbecher (2005) desarrolla un modelo numérico que explora los patrones de flujo subterráneo en las inmediaciones de lagos salinos, con particular atención a los efectos de convección inducida por diferencias de densidad. Estas diferencias surgen del contacto entre aguas hipersalinas del lago y aguas subterráneas dulces, dando lugar a regímenes de convección libre y mixta. El estudio emplea el código FAST-C(2D), capaz de resolver acopladamente las ecuaciones diferenciales de flujo y transporte para medios porosos, incorporando funciones de densidad y viscosidad variables. Se analizan secciones verticales bidimensionales en condiciones de estado estacionario para identificar el comportamiento de sistemas influenciados por la salinidad y evaluar la influencia de parámetros adimensionales.

El número de Rayleigh ( $Ra$ ) es identificado como el parámetro clave para predecir la aparición de convección inducida por densidad. El autor realiza simulaciones variando  $Ra$  entre 1 y 400, demostrando que mayores valores intensifican los flujos convectivos en la zona bajo los lagos (*Figura 2.3*). Esto es particularmente relevante en ambientes tipo salar, donde los gradientes de densidad provocan inversión del flujo habitual, favoreciendo el ingreso y mezcla de salmuera en profundidad y posterior surgencia hacia el borde del lago.

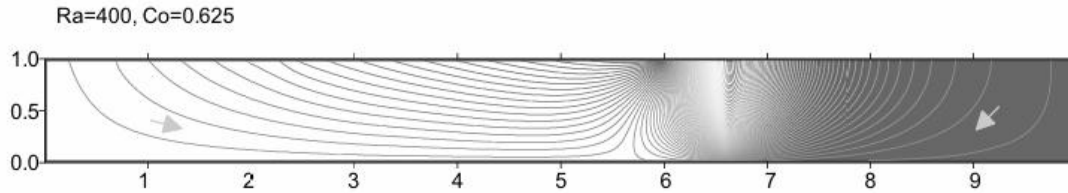


**Figura 2.3:** Representación gráfica de los resultados del estudio de Holzbecher (2005) a un número de Rayleigh de 400. La región oscura indica alta salinidad y la región clara, salinidad baja. Las flechas la dirección de los flujos.

A medida que la tecnología avanzaba, se podían realizar modelos más complejos con enfoques geoquímicos acoplados. Vásquez et al. (2013) simularon, mediante el código SHEMAT, el transporte reactivo multicomponente en la zona oriental del salar de atacama, logrando reproducir el zonamiento mineral observado empíricamente a través de la *Figura 2.4* [17]. Su modelo, que al igual que los anteriores era bidimensional, consideró la precipitación y disolución química de los principales minerales que se pueden hallar como halita, calcita y yeso, y evidenció cómo estos procesos alteran la porosidad y modifican el patrón de flujo.

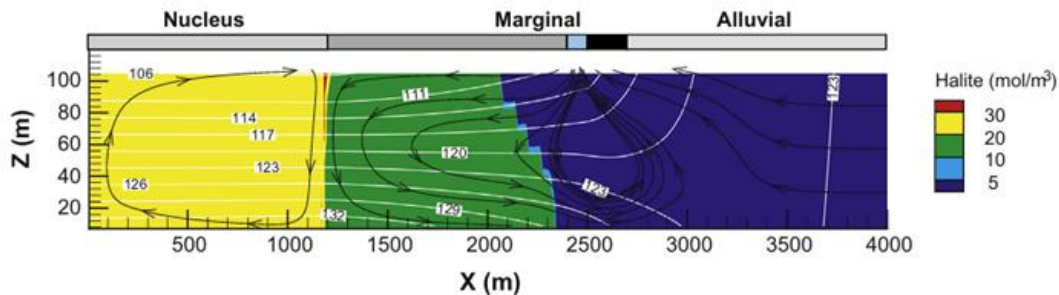


**Figura 2.4:** Resultado del estudio de Vásquez et al. (2013) donde se muestra la distribución espacial de la halita con su respectiva concentración. Las líneas negras muestran la dirección del flujo.

En una escala conceptual más amplia, Hamann et al. (2015) integran un modelo de flujo inducido por densidad con reacciones geoquímicas acopladas, evaluando la evolución de salmueras bajo condiciones de evaporación prolongada [28]. Esta es la primera vez que adherían PHREEQC a los estudios de salares. El modelo presentaba dos enfoques, uno solo de flujo, haciendo uso de las capacidades de SEAWAT de la *United States Geological Survey*, y otro con transporte de reactivos, utilizando PH3TD. El modelo logró reproducir patrones de precipitación de evaporitas y resaltó la importancia del número de Rayleigh (al igual que Holzbecher) en la formación de estructuras de flujo convectivo. En este punto ya se hacían

notorias las similitudes entre las dimensiones de los modelos, la ubicación espacial a la que estaban destinados y las condiciones de borde de estos, cuantificados según las entradas y las salidas de los sistemas salinos endorreicos.

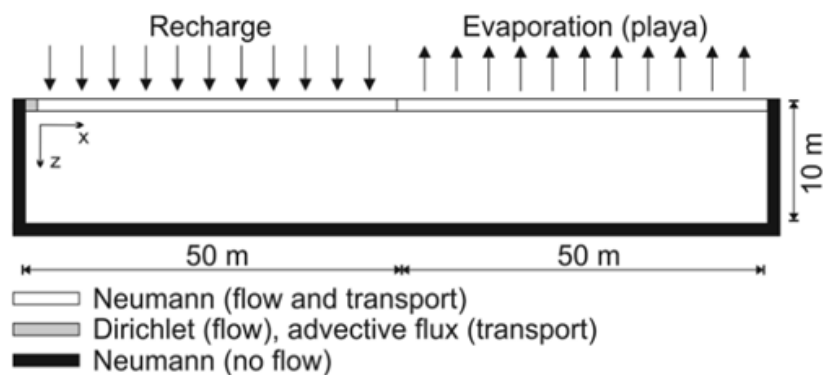


**Figura 2.5:** Dominio del modelo desarrollado por Hamann et al. (2015) junto con las condiciones de borde.

Corenthal et al. (2016) elaboraron un modelo regional de flujo subterráneo para interpretar la génesis y acumulación de depósitos evaporíticos masivos en el margen occidental del Altiplano chileno [29]. El estudio combinó simulaciones numéricas transitorias con análisis isotópicos, lo que permitió sustentar la hipótesis de que los flujos de recarga provenientes de zonas altas de la cuenca pueden concentrarse y ser conducidos hacia sectores más internos, favoreciendo la acumulación de evaporitas en el núcleo de los salares.

En los últimos años, Miguel Ángel Marazuela y su equipo han impactado significativamente en la comprensión del funcionamiento hidrodinámico del salar, particularmente en lo relativo a la zona de mezcla entre aguas dulces y salmueras, el comportamiento de los flujos subterráneos y los efectos del bombeo de salmuera sobre el sistema natural. En Marazuela et al. (2018) [22], desarrollan un modelo tridimensional detallado para representar la zona de transición entre agua dulce y salmuera en salares similares al de Atacama. El modelo fue aplicado en un sistema conceptual basado en datos del propio salar e integró múltiples líneas de evidencia: cartografía geofísica, datos de perforaciones e hidroquímica y observaciones satelitales con topografía de alta resolución. Este enfoque permitió caracterizar en 3D la geometría y dinámica de la cuña salina, reconociendo que su estructura no es estática, si no que responde a gradientes de densidad, flujo lateral de recarga y

evaporación superficial. Además, el modelo permitió definir de manera más precisa los límites y comportamientos de la zona interna, media y externa de mezcla, lo que aporta una base física clave para estudios de impacto, extracción o reinyección de salmueras.

En Marazuela et al. (2019a), se realizó una evaluación integral del funcionamiento hidrodinámico de toda la cuenca del Salar de Atacama, incorporando tanto información pública como datos privados provenientes de empresas que operan en el área [16]. Este trabajo incluyó una detallada caracterización hidrogeológica, junto con una modelación numérica tridimensional calibrada mediante el software FEFLOW, herramienta especializada en simulaciones de flujo y transporte en medios porosos. El estudio permitió establecer una línea base hidrológica robusta, clave para comprender el comportamiento del sistema bajo condiciones naturales y para proyectar los efectos de intervenciones antrópicas como la extracción de salmuera.

A partir de esta línea base, en Marazuela et al. (2019b), se abordó específicamente el impacto de las actividades extractivas de litio sobre la dinámica del salar [30]. Mediante simulaciones numéricas en régimen transitorio, se analizó la respuesta del sistema frente a diferentes escenarios de bombeo de salmuera (*Figura 2.6*). Aunque previamente se reconocía una tendencia a la baja en los niveles freáticos, los resultados obtenidos fueron reveladores en cuanto a la capacidad de amortiguación natural del sistema salino frente a perturbaciones ajenas. Esta amortiguación se explica principalmente por la baja permeabilidad del núcleo del salar y la existencia de zonas de flujo extremadamente lento, que actúan como barreras naturales ante cambios bruscos en los gradientes hidráulicos.

Sin embargo, el estudio también identificó consecuencias importantes. Entre ellas, una disminución progresiva de los flujos verticales hacia zonas de descarga superficial, como lagunas y humedales. Esta reducción, derivada del descenso del nivel freático en las zonas marginales del salar, puede comprometer la disponibilidad de agua para ecosistemas frágiles, incluyendo cuerpos hídricos como Soncor, Burro Muerto y Tilopozo. Tales hallazgos son cruciales para la gestión sustentable del recurso hídrico y la conservación ecológica del salar.

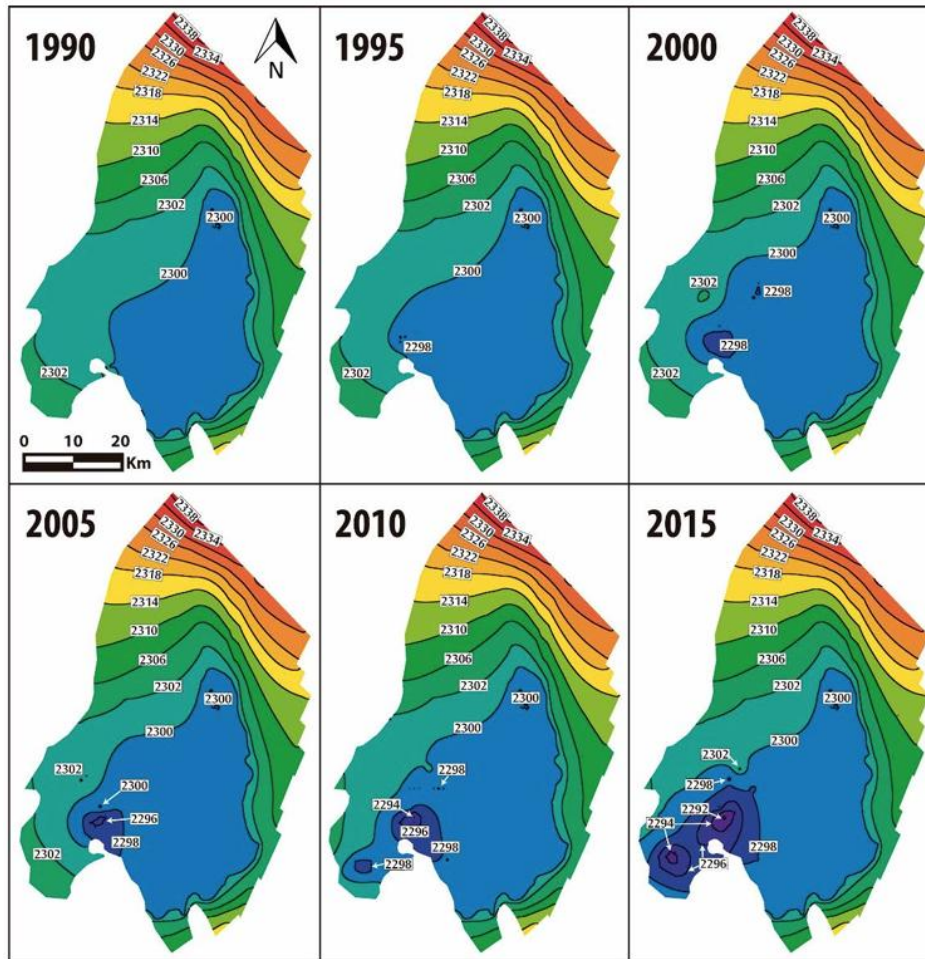


**Figura 2.6:** Mapas de contorno del nivel freático resultantes del modelo numérico desarrollado por Marazuela et al. (2019b).

Todos estos trabajos son actualmente referencia obligada para cualquier investigación hidrogeológica en un entorno como Atacama. Su relevancia radica, además, en que los modelos propuestos han sido validados y reproducidos por múltiples instituciones, y han sido usados para apoyar decisiones regulatorias y ambientales en la gestión del litio en Chile [31].

#### **2.1.4. Condiciones de borde en modelación numérica de salares**

En los modelos de flujo subterráneo es necesario definir condiciones de contorno para resolver de forma única el sistema de ecuaciones diferenciales impuestas por el software que se empleará. Estas condiciones permiten establecer el comportamiento del sistema en los límites del dominio

modelado y, por ende, son esenciales tanto para garantizar la estabilidad numérica como la validez física del modelo.

Existen principalmente dos tipos de condiciones de borde aplicables en hidrogeología:

- **Condición de Dirichlet:** Desde el punto de vista hidráulico, una condición de este tipo implica fijar el valor de una variable de estado en la frontera del dominio. En el contexto de flujo subterráneo, esto se traduce en imponer un nivel piezométrico o carga hidráulica específica en una sección del dominio.
- **Condición de Neumann:** Consiste en fijar el valor del flujo en la frontera del dominio, es decir. En términos hidráulicos, representa una entrada o salida de agua, con flujo neto, a través del límite del dominio.

Ambas condiciones son esenciales para cerrar el sistema matemático y permitir la resolución de la ecuación de flujo.

## 2.2. Método de extracción por evaporación

El método tradicional de extracción de litio en salares se basa en el conocido proceso evaporítico, resumido en la *Figura 2.7*. Se bombea la salmuera a presión desde la profundidad hacia la superficie, se deposita en grandes estanques especialmente diseñados para la operación, con una profundidad promedio de unos 30 centímetros y una extensión de centenares de hectáreas, donde, a través de distintas etapas, se evapora lentamente el agua y van precipitando sales con una solubilidad más baja que el cloruro de litio [8][32]. Finalmente se obtiene una salmuera concentrada (alrededor del 6% en relación con el total) la cual es sometida a una purificación química para producir carbonato (*LCE*) o hidróxido de litio ( $\text{LiOH}$ ) en función de la calidad requerida para la producción de baterías. Para aumentar la rentabilidad del proceso se puede trabajar con productos adicionales como sales de potasio o magnesio, usadas en la industria química y de fertilizantes, para su comercialización.

El proceso de evaporación solar presenta tanto ventajas como desventajas, las cuales se resumen en la *Tabla 2.1*. Esta tecnología, utilizada para la concentración de salmueras, ha sido ampliamente probada y aplicada con éxito durante décadas. Por ejemplo, el Salar de Atacama cuenta actualmente

con tres plantas con piscinas evaporíticas, dos de ellas pertenecientes a la Sociedad Química y Minera de Chile (SQM) que comenzaron sus actividades en el año 1994 y 1996 y la tercera, que pertenece a la compañía chilena Albemarle, partió en el año 1984.

El uso de la energía solar en lugares remotos del continente, sin acceso a gas o electricidad directa, es una excelente manera de ahorrar en costos de operación y reducir la huella de dióxido de carbono de los proyectos. Los costos de producción son generalmente inferiores a las tecnologías alternativas y a cualquier actividad minera en general, reduciéndose aún más mediante la producción de subproductos comerciales.

**Tabla 2.1:** Principales ventajas y desventajas del proceso de evaporación solar para la extracción de litio.

| Ventajas                                                                                  | Desventajas                                                                         |
|-------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|
| Tecnología probada y escalable                                                            | Perdida de agua por efecto de la evaporación                                        |
| Reduce la huella de carbono del proceso mediante el uso de energía solar renovable        | Requiere grandes superficies para la instalación y puesta en marcha de las piscinas |
| Cristalización de subproductos de valor comercial sin la necesidad de captación selectiva | Largos tiempos de evaporación, van desde los 10 hasta los 24 meses                  |
| Costos de inversión y operación relativamente bajos                                       | Es dependiente de los factores climáticos del sector                                |
| Alto margen de ganancias desde que se recupera la inversión                               | Es necesario almacenar y disponer grandes cantidades de sales residuales            |

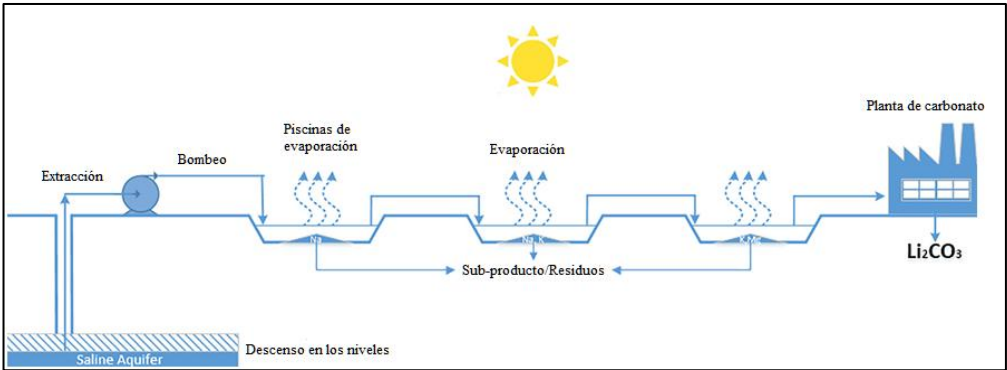


**Figura 2.7:** Representación esquemática del método evaporítico. Modificado de Flexer et al., 2018.

Pese a los numerosos beneficios, no se pueden obviar las claras deficiencias del método tradicional, en particular a lo que refiere al consumo hídrico y la respectiva huella ecológica. Una de ellas son las grandes extensiones que se

necesitan para instalar las piscinas, que, en la actualidad, cuentan con centenares de hectáreas destinadas para este fin, afectando principalmente a la fauna local.

Por otra parte, la principal desventaja asociada al uso continuo de la evaporación solar radica en la elevada cantidad de salmuera que debe ser extraída desde el subsuelo hacia las pozas de evaporación, junto con la considerable pérdida de agua salada que este proceso implica. Esto resulta especialmente crítico en zonas donde el recurso hídrico ya es escaso. Dependiendo de la concentración de litio en la salmuera y de la concentración final deseada, deben evaporarse típicamente entre 200 y 600 m<sup>3</sup> de agua por cada tonelada de *LCE* producida [8]. La protección del equilibrio hidrológico y de las tasas máximas permitidas de bombeo tanto de salmuera como de agua fresca, es un punto de discusión constante entre las empresas mineras, las comunidades locales y las agencias medioambientales. El entorno hidrogeológico de un salar es complejo, y la simulación hidrológica para predecir los efectos de las interacciones entre diferentes acuíferos a largo plazo tiene sus limitaciones [33]. En general, se teme que la extracción constante de salmuera reduzca gradualmente el nivel de las aguas subterráneas, lo que podría afectar a los recursos colindantes de agua dulce [30]. Por lo tanto, durante la fase de explotación se requiere un seguimiento estricto y continuo de los volúmenes de extracción de salmuera y de agua dulce, de los niveles de agua y de la calidad de esta, que permita controlar el impacto de la extracción y procesamiento de la salmuera sobre los recursos hídricos. El objetivo de todo seguimiento medioambiental debe ser demostrar que el proyecto no pone en peligro el abastecimiento de agua de las comunidades locales ni repercute negativamente en la flora y la fauna del ecosistema del salar.

## **2.3. Tecnologías de extracción directa de litio**

Para superar las limitaciones de la evaporación solar en la extracción, se requieren procesos que extraigan selectivamente el litio de las salmueras de manera eficiente y con alto rendimiento. Las tecnologías de extracción directa de litio (*DLE*) representan una alternativa emergente y prometedora frente al método tradicional. Aquí, se busca extraer el metal directamente desde la salmuera, sin necesidad de etapas prolongadas de concentración por

evaporación ni precipitación de sales intermedias, permitiendo obtener un concentrado de alta pureza en menor tiempo y con menor huella hídrica [8][9][32][34].

En términos generales, estas tecnologías consisten en etapas de captación selectiva, que permiten separar el litio de los demás componentes disueltos en las salmueras [9]. El proceso finaliza con una etapa de purificación, que permite recuperar el litio en forma de solución concentrada, lista para ser procesada como carbonato o hidróxido de litio (*Figura 2.8*). Si bien la aplicación de este método es relativamente reciente en la industria del litio, tecnologías como la adsorción y la extracción por solventes ya se utilizan a escala comercial en otros sectores, como la minería del cobre. Asimismo, el intercambio iónico forma parte de los procesos convencionales de extracción de litio, principalmente para el control y remoción de impurezas.

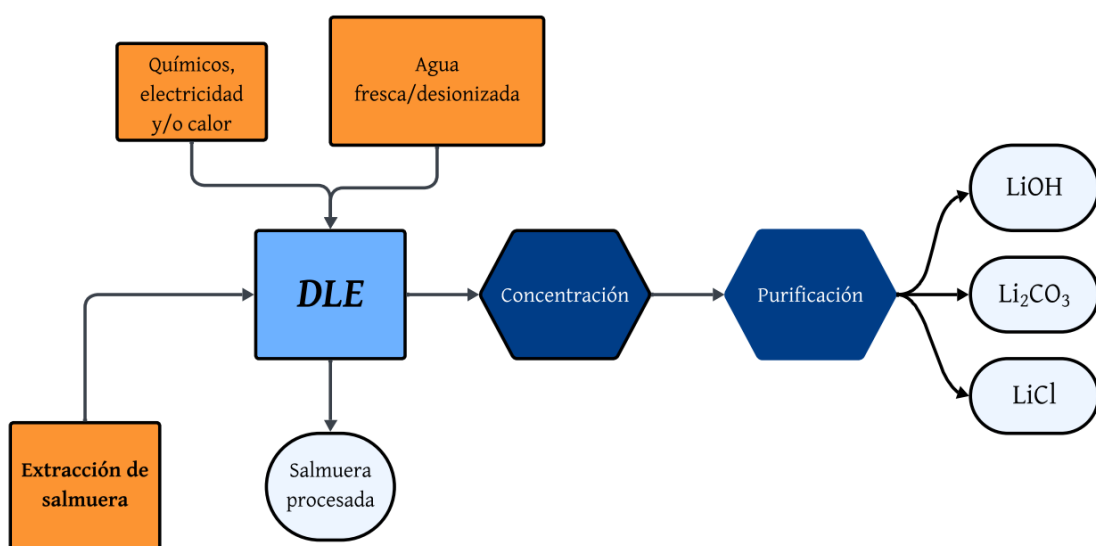


**Figura 2.8:** Proceso DLE general aplicado a las salmueras. Elaboración propia.

La reciente publicación de la Estrategia Nacional del Litio en Chile marca un paso decisivo hacia la implementación de políticas de explotación que buscan posicionar al país como líder en la producción mundial. Esta nueva estrategia surge de un proceso de consulta amplio, que ha incorporado la visión de diversos actores nacionales e internacionales, incluidos operadores y desarrolladores de proyectos [7]. Para alcanzar estos objetivos, el camino más viable es la adopción de tecnologías de extracción directa de litio, capaces de responder a las exigencias actuales sin comprometer la sustentabilidad del

recurso. Estos métodos pueden agruparse en cuatro categorías principales [9][34]:

1. **Adsorción selectiva:** Utiliza materiales sólidos que retienen específicamente los iones de litio. Una vez saturado el adsorbente, el litio se libera mediante un cambio de pH o solución desorbente.
2. **Intercambio iónico:** Emplea resinas intercambiadoras de iones con alta afinidad por el litio, desplazando otros cationes presentes en la salmuera; requiere un diseño químico preciso para evitar interferencias por los iones del sodio, el magnesio o el potasio.
3. **Extracción con solventes:** Usa solventes orgánicos que forman complejos selectivos con el litio. Es una tecnología con alto grado de control químico y la más conocida comercialmente, pero requiere tratamiento posterior de residuos
4. **Separación con membranas:** Utiliza membranas selectivas (por carga o tamaño) para separar iones litio del resto, mediante procesos como nanofiltración, ósmosis inversa o electrodiálisis.

Una de las más importantes ventajas es la disminución drástica del tiempo de procesamiento, que pasaría de meses a días o incluso horas. Esto va de la mano con el aumento en la recuperación de litio, la menor dependencia de los factores climáticos y el gran potencial para tratar salmueras con bajo contenido de litio. El mayor desafío es la generación de residuos líquidos o salmueras residuales que requieren gestión responsable. Algunos autores sugieren el tratamiento de estas salmueras para su posterior uso industrial [8], otros, sugieren hacer uso del método de evaporación para tratar las salmueras residuales [35], pero esto llevaría a la misma problemática del consumo hídrico que se ha planteado hasta el momento.

## 2.4. Reinyección de salmueras

La reinyección de salmueras se ha convertido en una de las estrategias más prometedoras para reducir el impacto ambiental de la extracción del metal blanco a partir de salmueras continentales, especialmente en el contexto de las tecnologías *DLE*. Este proceso consiste en devolver al subsuelo, bajo condiciones controladas, las salmueras residuales que han sido previamente procesadas para extraer el litio, evitando así su evaporación superficial o descarte en estanques de infiltración (*Figura 2.9*).

Según Zelandez y Summit Nanotech (2024) [36], la reinyección cumple funciones fundamentales para la sostenibilidad del sistema hidrológico del salar. La principal es la preservación de los niveles freáticos, disminuidos por las actividades humanas, especialmente en la cercanía a los pozos de extracción ubicados en el núcleo [9][36]. Al devolver fluidos al acuífero, se evita el descenso excesivo de la salmuera y la intrusión de agua dulce o salobre desde los márgenes, aspecto esencial para proteger los ecosistemas y mantener el gradiente hidráulico natural. De la misma manera, ayuda a prevenir la subsidencia del terreno al mantener la presión en el acuífero, reduciendo el riesgo de colapso estructural o compactación de sedimentos, tomando mayor relevancia en zonas con rocas finas o costras de halita.

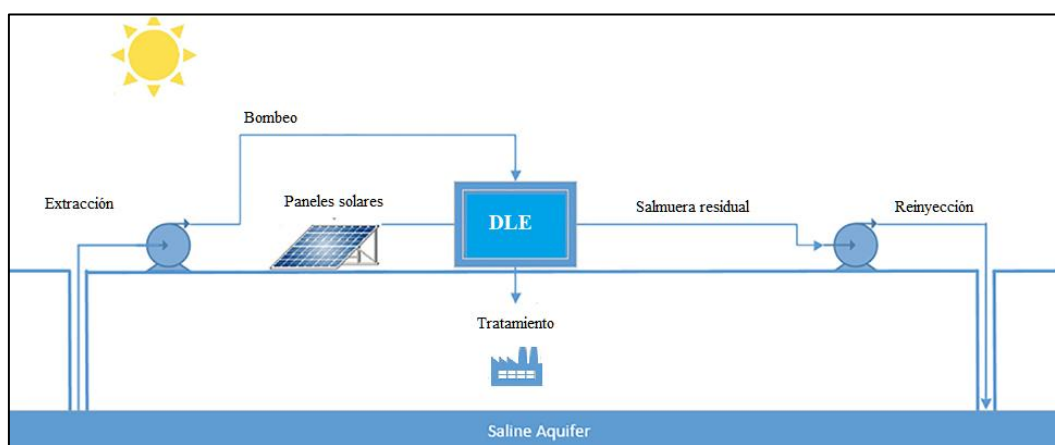


**Figura 2.9:** Representación esquemática de la extracción directa de litio con reinyección a los acuíferos. Modificado de Flexer et al., 2018.

Técnicamente, la reinyección no es un concepto ajeno a las operaciones actuales en el Salar de Atacama. Algunas compañías, como SQM, ya implementan lo que se conoce como "reinyección indirecta", que consiste en disponer las salmueras residuales en depósitos superficiales o estanques de descarte, desde donde el fluido se infiltra gradualmente hacia el subsuelo [37]. Si bien esta práctica permite cierta recuperación del recurso, carece de control hidráulico directo y no garantiza un restablecimiento efectivo del balance hídrico del acuífero. El verdadero desafío técnico y conceptual consiste en evolucionar desde esta reinyección pasiva hacia un modelo de reinyección activa o forzada, enmarcado en el contexto de tecnologías de extracción directa de litio (*DLE*), donde las salmueras tratadas son restituidas al sistema de forma controlada, presurizada y geográficamente estratégica.

Desde una perspectiva hidrogeológica, el trabajo de Grant y Morgan (2019) destaca que la reinyección no debe ser vista solo como una medida de

mitigación, sino también como una oportunidad estratégica para gestionar activamente la presión del acuífero [38]. A este enfoque le denominaron “*Re-Injection Enhanced Production (REP)*” y propone utilizar la salmuera agotada como una cuña de presión en los márgenes del salar, promoviendo una mayor extracción desde el núcleo y actuando, además, como una barrera para evitar la dilución por aguas de menor calidad química.

#### **2.4.1. Estado del arte de la reinyección**

La implementación adecuada de sistemas de reinyección de salmueras tratadas en los salares enfrenta actualmente una serie de desafíos de carácter químico, geológico y normativo [39]. Uno de los retos técnicos se relaciona con la modificación de la composición de la salmuera residual producto del método de extracción escogido. Este cambio puede inducir reacciones de precipitación de mineral (como carbonatos o sulfatos, los más comunes en los bordes de la cuenca), generar incrustaciones en las zonas de inyección y provocar una reducción de la permeabilidad del medio poroso, especialmente en acuíferos de baja conductividad hidráulica [36]. La compatibilidad geoquímica entre la salmuera reinyectada y el acuífero receptor, por tanto, debe evaluarse cuidadosamente mediante simulaciones multicomponente que consideren la evolución temporal de las especies químicas, el equilibrio de fases y los posibles procesos de adsorción o intercambio iónico [9][40].

A esto se suma la complejidad estratigráfica del entorno, caracterizado por una alta heterogeneidad en la litología, presencia de interfaces salinas, acuíferos poco profundos y zonas de mezcla altamente sensibles [23][33].

Desde el punto de vista institucional, uno de los principales obstáculos para avanzar en esta tecnología es la ausencia de una normativa clara y específica que regule el diseño, ejecución y control ambiental de la reinyección en contextos salinos. La falta de estándares técnicos puede generar incertidumbre tanto para los operadores como para las comunidades locales, afectando la confianza en la efectividad de estas prácticas y su legitimidad social. En este sentido, resulta fundamental que los marcos regulatorios se anticipen al desarrollo de las tecnologías de extracción y recuperación, integrando criterios técnicos, ecológicos y de gobernanza del recurso hídrico.

La literatura técnica y las recomendaciones de expertos internacionales sugieren que la implementación de esquemas de reinyección sustentables

debe basarse en una estrategia integrada que considere simultáneamente aspectos hidráulicos, geoquímicos, operacionales y ambientales [9][36][38]. En términos de diseño, se recomienda la utilización de modelos numéricos acoplados que combinen el uso de softwares como MODFLOW, que simula el flujo de agua subterránea en medios porosos mediante diferencias finitas, o FEFLOW, que permite modelar flujo y transporte en medios complejos con elementos finitos. Estas herramientas pueden integrarse con PHREEQC, un código especializado en la simulación de reacciones geoquímicas multicomponente, incluyendo equilibrio químico, cinética de reacciones minerales, intercambio iónico y procesos de adsorción.

Leonard Zourek en 2020, en colaboración con la empresa Zelandez, realizaron un trabajo preliminar de modelamiento mediante MODFLOW para estimar el flujo subterráneo cercano a distintos pozos de reinyección ubicados estratégicamente cercanos a la zona mixta, en la parte sureste del salar [9]. Los resultados muestran que la reinyección puede generar un montículo hidráulico capaz de reducir la intrusión de agua dulce de la zona de mezcla hacia el núcleo salino, equilibrando parcialmente el déficit hídrico inducido por la actividad minera (*Figura 2.10*). Sin embargo, se identifican limitaciones críticas: tasas de reinyección elevadas inducen un aumento de la evaporación y riesgo de desbordamiento superficial, además de la posible inversión del gradiente hidráulico natural, lo que provocaría el flujo de salmuera hacia los ecosistemas de agua salobre, afectando la biodiversidad.

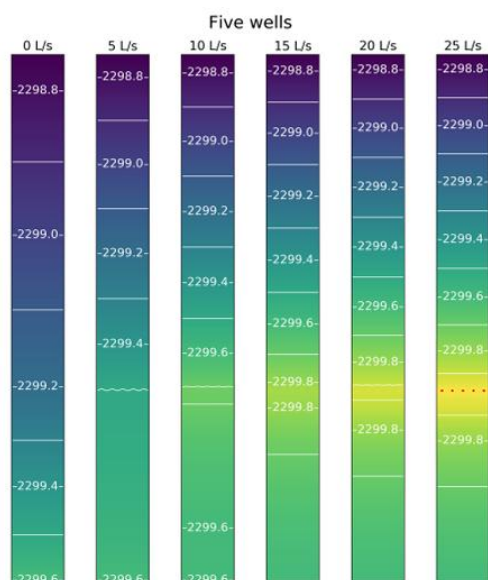


**Figura 2.10:** Resultado del estudio de Leonard Zourek (2020) donde muestra el cambio en el nivel freático a diferentes tasas de reinyección.

Stefan Walter desde Summit Nanotech, en 2024, evalúa de forma global la factibilidad de la reinyección como mecanismo para mantener la presión hidrostática de la zona de la salmuera, contribuyendo a la protección de recursos hídricos superficiales utilizados por comunidades y ecosistemas [40]. Para abordar el problema, desarrollaron un estudio aplicado a dos acuíferos sintéticos análogos, el conocido Salar de Atacama y, por primera vez, el Salar de Maricunga. Al sostener las presiones de poros, la reinyección también mitigaría la subsidencia y la disminución de eficiencia en los pozos de extracción. No obstante, la efectividad de esta solución depende crucialmente de la compatibilidad geoquímica entre el efluente *DLE* y la salmuera del reservorio. Los resultados subrayan la importancia de minimizar el contraste geoquímico (densidad, pH y composición general) para evitar precipitación indeseada y obstrucción, además de considerar efectos de gradientes térmicos.

Si bien la reinyección controlada de salmueras agotadas en litio, gracias a estos trabajos, presenta una base teórica sólida y múltiples beneficios operacionales ya conocidos, su aplicación real en salares sudamericanos aún es incipiente. La sostenibilidad de la industria del litio dependerá no solo de la eficiencia tecnológica de los procesos *DLE*, sino también de la capacidad de implementar estrategias responsables en el manejo del agua y de los residuos líquidos derivados de estos procesos [8][39]. De la misma forma, su efectividad dependerá de que esté sustentada en estudios rigurosos, una sólida línea base hidrogeoquímica, y procesos de participación temprana con comunidades y autoridades, que aseguren su aceptación y monitoreo transparente a largo plazo. Chile tiene la oportunidad de estar a la cabeza de este proyecto teniendo como principal actor al Salar de Atacama y toda la información que rodea al sistema extracción-acuífero.

## 2.5. PHAST

PHAST (*PHREEQC and HST3D*) es un software desarrollado por el *United States Geological Survey (USGS)* diseñado para simular, en condiciones de estado estacionario o transitorio, el flujo subterráneo de agua, el transporte de especies químicas disueltas y las reacciones geoquímicas en medios porosos completamente saturados [41]. Su principal fortaleza radica en que combina un modelo de flujo y transporte tridimensional con una descripción

detallada del comportamiento químico multicomponente del sistema acuoso, permitiendo representar sistemas naturales complejos como salares, acuíferos contaminados o zonas de mezcla entre aguas de distinta composición. Ha sido utilizado en múltiples estudios hidrogeoquímicos a nivel internacional, incluyendo simulaciones de intrusión salina, lixiviación en contaminantes, evolución geoquímica de salares y diseño de estrategias de uso de suelos [42][43][44].

El núcleo numérico de PHAST para resolver la ecuación de flujo subterráneo en medios saturados se basa en la ley de Darcy y la ecuación de continuidad:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \mathbf{q} = Q \quad (2.1)$$

Donde  $S_s$  es el coeficiente de almacenamiento específico (1/m);  $h$  la carga hidráulica (m);  $t$  es el tiempo (s);  $Q$  es la intensidad del caudal de la fuente (1/s), que puede incluir extracción por pozos, recarga, evaporación, entre otros y  $\mathbf{q}$  es el flujo de agua subterráneo del medio poroso, obtenido mediante la ley de Darcy:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{K} \nabla (h(x, y, z)) \quad (2.2)$$

Reemplazando, se obtiene la ecuación (2.3) para el flujo de agua subterráneo en medios porosos, tridimensional:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mathbf{K}_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mathbf{K}_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mathbf{K}_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + Q \quad (2.3)$$

$$\text{Con } h = \frac{p}{\rho g} + z \quad (2.4)$$

Donde  $\mathbf{K}$  es el tensor de conductividad hidráulica (m/s);  $p$  es la presión (Pa);  $\rho$  es la densidad del agua (kg/m<sup>3</sup>);  $g$  es la aceleración de gravedad (m/s<sup>2</sup>) y  $z$  es la coordenada de elevación (m). La ley de Darcy relaciona el caudal específico con el gradiente hidráulico. Por lo tanto, la velocidad intersticial (m/s) vendría dada por:

$$\mathbf{v} = -\frac{\mathbf{K}}{\phi} \nabla h \quad (2.5)$$

Donde  $\phi$  es la porosidad en el medio saturado (sin unidad de medida). Como modelo numérico acoplado entre flujo y geoquímica, incorpora varias simplificaciones que permiten resolver estas ecuaciones de manera más eficiente computacionalmente [41]:

- **Densidad constante del medio saturado**, sin considerar el efecto de gradientes de densidad sobre el flujo. Sin embargo, PHAST sí considera variaciones de densidad para los cálculos geoquímicos (actividad iónica y especiación), pero sin retroalimentar el flujo.
- Temperatura constante y uniforme en todo el dominio, sin resolver la ecuación de energía térmica.
- **Sistema completamente saturado**, teniendo limitaciones a la hora de calcular la evaporación superficial directa, no así para la evaporación dependiente del nivel freático.
- No incluye variación de viscosidad ni compresibilidad del fluido. **Se considera incompresible y de viscosidad constante** ante condiciones de flujo no confinado.
- Difusión molecular constante.
- La dispersión se representa mediante coeficientes de longitudinal y transversal, definidos para cada material.
- Las reacciones químicas no inducen cambios ni en la porosidad ni en la permeabilidad.

La ecuación para la conservación de un único componente acuoso se basa en los siguientes supuestos: se desprecia la difusión por presión; el transporte de solutos por fluctuaciones locales, intersticiales y del campo de velocidad, así como la mezcla en las uniones porosas, se describe mediante un tensor de coeficiente de dispersión hidrodinámico; se desprecia la difusión forzada por campos gravitacionales, eléctricos y de otro tipo; por último, no existen fuentes de solutos difusivos puros en las fases fluida o de matriz porosa. La forma general de la ecuación de transporte de soluto reactivo (advección-difusión) para el componente  $j$  en la fase acuosa con reacciones tanto de equilibrio como cinéticas se define como:

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} = -\nabla \cdot (vC_j) + \nabla \cdot (D\nabla C_j) + R_j \quad (2.6)$$

Donde  $C$  es la concentración total de especie iónica (mol/m<sup>3</sup>);  $D$  es el tensor del coeficiente de dispersión (m<sup>2</sup>/s);  $v$  la velocidad intersticial expuesta en la ecuación (2.5) y  $R$  representa las reacciones químicas. Estas últimas se resuelven mediante balance de masa para cada componente, ecuaciones de equilibrio químico y reacciones cinéticas, implementadas a través del motor de PHREEQC. En términos generales,  $R$  podría expresarse como:

$$R = q\phi\rho\hat{c}_j - \sum_{e=1}^{N_E} v_{j,e}^E \frac{\partial}{\partial t} (\phi\rho\bar{c}_e) + \sum_{k=1}^{N_K} v_{j,k}^K \phi\rho R_k ; j = 1, \dots, N_c \quad (2.7)$$

Con  $\hat{c}_j$  es la concentración acuosa del total del componente  $j$  en el agua (mol/kgw);  $N_E$  es el número de reacciones de equilibrio heterogéneas;  $v_{j,e}^E$  es el coeficiente estequiométrico del componente  $j$  en la reacción de equilibrio heterogéneo  $e$  (sin unidad de medida);  $\bar{c}_e$  es la concentración del reactivo sólido  $e$  (mol/kgw);  $N_K$  es el número de reacción cinética;  $v_{j,k}^K$  es el coeficiente estequiométrico del componente  $j$  en la reacción cinética  $k$  (sin unidad de medida);  $R_k$  es el ratio de la reacción cinética  $k$  (mol/kgw×s) y  $N_c$  es el número de componentes químicos en el sistema. La ecuación (2.5) se escribe para cada componente acuoso presente.

El programa se compone de tres módulos esenciales, que deben estar correctamente configurados para ejecutar simulaciones completas [41]:

**Módulo de flujo y transporte:** Es el motor hidrodinámico de la simulación. Controla como fluye el agua y como se transportan las especies químicas por advección y dispersión. Contiene la definición de la malla del modelo, las medidas y su extensión, las propiedades físicas del acuífero (conductividad hidráulica, porosidad, permeabilidad, etc.), las condiciones de flujo y los parámetros de transporte de solutos.

**Base de datos termodinámica:** PHAST requiere una base de datos química que contenga las constantes de equilibrio, entalpías de formación, log K, y parámetros de complejos para las especies químicas involucradas. Por defecto, utiliza versiones compatibles con las bases de PHREEQC como *phast.dat*, *wateq4f.dat*, o bases personalizadas ajustadas para salmueras de alta concentración (por ejemplo, modificadas para el Salar de Atacama).

**Módulo geoquímico:** Define la química inicial del sistema, es decir, la concentración de especies químicas, minerales presentes y reacciones en cada celda o zona del modelo. Este módulo se integra junto a PHREEQC, y su uso es opcional ya que no se requiere para la simulación de flujos de agua. Para obtener dicho módulo, la simulación realizada en este último se guarda en formato *prefix.chem.dat* a través de *SELECTED\_OUTPUT*.

Teniendo estos archivos, PHAST resolverá el conjunto de ecuaciones fundamentales en el orden expuesto en la **Figura 2.11**: Esquema del funcionamiento de PHAST y la relación entre los inputs y los outputs. Modificado de Charlton, Kipp, & Parkhurst, 2011. *Figura 2.11* para proporcionar, mediante un comando que el usuario

puede modificar, los resultados en distintos formatos, ya sea de texto o tabulares y un archivo *HDF* que puede ser utilizado mediante un visualizador en específico que viene con el paquete de instalación del programa, denominado **Model Viewer** [45].

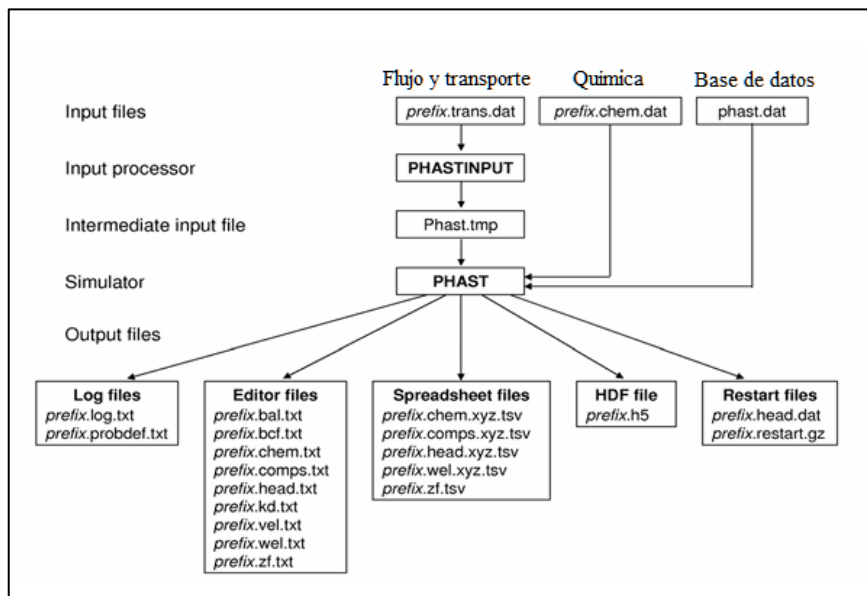


**Figura 2.11:** Esquema del funcionamiento de PHAST y la relación entre los inputs y los outputs. Modificado de Charlton, Kipp, & Parkhurst, 2011.

### 2.5.1. PHREEQC

PHREEQC es otro software de código libre desarrollado por el *USGS* para realizar simulaciones geoquímicas en sistemas acuosos. Su nombre proviene de “**pH-REdox-EQ**uilibrium”, reflejando su capacidad para resolver equilibrios químicos complejos en soluciones naturales y contaminadas. Está diseñado para modelar procesos geoquímicos en sistemas cerrados, abiertos, estáticos o dinámicos, con una amplia gama de aplicaciones en hidrogeoquímica, minería, calidad del agua, residuos peligrosos, recuperación de minerales, entre muchos otros [46]. Entre sus capacidades, permite modelar procesos como reacciones de óxido-reducción, disolución y precipitación de minerales, intercambio iónico en sitios específicos (por ejemplo, arcillas), reacciones de superficie, interacción con gases y reacciones cinéticas dependientes del tiempo.

El programa, escrito en los lenguajes de programación de *C* o *C++*, opera mediante *scripts* de entrada en texto plano, los cuales definen las condiciones

iniciales y las condiciones del sistema. El archivo de entrada (*input*) está organizado en **KEYWORDS** y bloques de comando tales como:

- **SOLUTION**: Utilizado para definir la temperatura y composición química de las soluciones iniciales.
- **SOLUTION\_SPECIES**: Este comando permite describir reacciones químicas, log K, y parámetros del coeficiente de actividad para cada especie acuosa.
- **SOLUTION\_MASTER\_SPECIES**: Se utiliza para definir los nombres correspondientes entre los elementos y las especies primarias y secundarias acuosas.
- **EQUILIBRIUM\_PHASES**: Comando que se emplea para definir las cantidades de un conjunto de fases puras que pueden reaccionar de forma reversible con la fase acuosa. Cuando las fases incluidas en este comando se ponen en contacto con una solución acuosa, cada fase se disolverá o precipitará para alcanzar el equilibrio o se disolverá por completo.
- **EXCHANGE\_MASTER\_SPECIES**: Define la especie primaria de intercambio que actúa como base para una familia de especies intercambiables.
- **EXCHANGE\_SPECIES**: Define todas las reacciones de intercambio iónico posibles entre los iones disueltos y los sitios de intercambio junto con sus constante de equilibrio y log K.
- **EXCHANGE**: Este bloque se une en el input para asignar una cantidad de capacidad de intercambio a una solución, definir su composición inicial y asociarla a una celda o fase.
- **SURFACE\_MASTER\_SPECIES**: Este comando se utiliza para definir el nombre correspondiente a los sitios de unión de la superficie y las especies base de la superficie.
- **SURFACE\_SPECIES**: Este comando tiene como propósito definir una reacción y un log K para cada especie de superficie, incluidas las especies base de la superficie.
- **SURFACE**: Cumple la función de establecer la cantidad y composición de cada superficie en un conjunto de superficies. La composición de un ensamblaje de superficie se puede definir de dos maneras: (1) implícitamente o (2) explícitamente.
- **SELECTED\_OUTPUT**: Este comando se implementa para producir un archivo de salida con todos los parámetros seleccionados que es adecuado

para su procesamiento mediante hojas de cálculo y otro software de gestión de datos.

- *USER\_PUNCH*: Similar a *SELECTED\_OUTPUT*, permitiendo definir expresiones matemáticas personalizadas para imprimir datos calculados por PHREEQC que no están disponibles directamente en los bloques estándar.

Todas las reacciones de equilibrio se basan en ecuaciones de acción de masas que relacionan las actividades de las especies con una constante de equilibrio:

$$K = \frac{\prod_{prod} a_p^v}{\prod_{reac} a_r^v} \quad (2.8)$$

Donde  $K_i$  es constante de equilibrio,  $a$  es la actividad de la especie y  $v$  son los coeficientes estequiométricos del producto o reactante en la ecuación química. Las constantes de equilibrio son funciones de la temperatura. Las actividades de las especies acuosas se relacionan con las molalidades mediante coeficientes de actividad:

$$a = \gamma m \quad (2.9)$$

Con  $\gamma$  el coeficiente de actividad y  $m$  la molalidad. De forma automática, PHREEQC trabaja con mol/kg como unidad de concentración, sin embargo, cada persona usuaria le puede especificar la unidad con la que desea trabajar a través del comando *units* dentro del bloque *SOLUTION*.

La salida del programa entrega diferentes parámetros de calidad del agua como pH, potencial redox, actividad del agua, fuerza iónica, alcalinidad, las especiaciones y concentraciones de cada elemento, los índices de saturación, el producto de actividad iónica (IAP) y las constantes de equilibrio de cada fase.

El índice de saturación (SI) es un valor adimensional, positivo o negativo, que indica el grado de saturación de una cierta fase mineral en la solución. En efecto se distinguen tres casos, SI negativo implica que el agua está subsaturada en tal mineral, por lo que no hay precipitación; SI igual o muy cercano a cero, el agua está en equilibrio con el mineral evaluado, sin alcanzar precipitación todavía; por último, SI mayor a cero, existe sobresaturación en el mineral, por lo que el sólido podría precipitar.

## 2.6. Estabilidad numérica en modelos de transporte

En la modelación numérica de flujo subterráneo acoplado al transporte de solutos, es fundamental considerar criterios de estabilidad que garanticen la validez y precisión de los resultados. Uno de los indicadores que tiene relación con la estabilidad espacial es el **número de Peclet ( $Pe$ )**. Este es una medida que compara la importancia relativa del transporte por advección frente al transporte por dispersión o difusión, y se expresa como [41]:

$$Pe = \frac{\Delta x}{\alpha} \quad (2.10)$$

Donde  $\Delta x$  es el tamaño de celda (m) y  $\alpha$  la dispersividad (m). Valores altos de  $Pe$  ( $> 1$ ) indican un sistema advección-dominante, común en flujos subterráneos donde el movimiento del agua transporta los solutos más eficazmente que la difusión molecular. En cambio, valores bajos ( $< 1$ ), reflejan un sistema donde el transporte es dispersivo o difusivo-dominante, como podría observarse en medios de baja permeabilidad o en zonas de flujo estancado [47].

En la práctica, un valor de  $Pe > 2$  puede comenzar a producir dispersión numérica en esquemas de diferencias finitas, por lo que se deben tomar precauciones en la selección del mallado y el paso de tiempo, o bien, aplicar esquemas de mayor orden o correcciones por dispersión artificial [47].

Otro número adimensional que permite evaluar la estabilidad es el **número de Courant ( $CFL$ : Courant-Friedrichs-Lewy)**. Este es un criterio asociado al transporte advectivo, especialmente en esquemas explícitos y parcialmente implícitos. Se define como:

$$Courant = \frac{v\Delta t}{\Delta x} \quad (2.11)$$

Donde  $v$  es la velocidad intersticial del flujo (m/s);  $\Delta t$  es el paso de tiempo (s) y  $\Delta x$  es el tamaño de celda (m). Para evitar inestabilidades numéricas y garantizar una simulación confiable, se recomienda que este valor sea menor a 1, y preferentemente en el rango de 0.1 a 0.5 [47].

Ambos números cobran especial relevancia en la modelación de ambientes como el Salar de Atacama, donde se presentan fuertes gradientes de concentración, velocidades bajas, y mecanismos de transporte geoquímico

acoplados. Por ello, el diseño de la malla espacial, el esquema de tiempo y la configuración química deben considerar activamente las restricciones impuestas por Courant y Peclet, tanto para asegurar estabilidad numérica, como para evitar errores de interpretación hidrogeoquímica.

### 3. Metodología

Con base en los antecedentes expuestos en la Sección 2 y en función de los objetivos definidos en la Sección 1, se desarrolló un modelo numérico acoplado utilizando el software PHAST, complementado con un archivo geoquímico específico generado en PHREEQC. El propósito del modelo es evaluar el comportamiento hidrogeoquímico de una operación conceptual de reinyección de salmueras tratadas, aplicada al sistema lagunar de Tilopozo. El modelo busca representar de forma integrada los procesos de flujo subterráneo, transporte advectivo–dispersivo y las reacciones geoquímicas multicomponente asociadas a la interacción entre la salmuera reinyectada y el acuífero receptor. Para ello, fue necesario cuantificar el balance hídrico local, caracterizar las unidades hidrogeológicas presentes, definir sus propiedades físicas e hidráulicas, e incorporar una estimación representativa de las concentraciones iniciales de los principales elementos y especies químicas presentes en las salmueras naturales. Este modelo conceptual proporciona una base para analizar escenarios de reinyección controlada en condiciones realistas, incluyendo posibles cambios en la química del sistema, la evolución de los gradientes hidráulicos y la interacción con la zona de mezcla.

#### 3.1. Área de estudio

El sector de Vegas de Tilopozo está ubicado en la parte sureste del núcleo del Salar de Atacama y es uno de los cuatro sistemas lagunares que sustentan hábitats de especies endémicas como los flamencos andinos (*Figura 0.1*). Tilopozo, al igual que Soncor, Peine y Aguas de Quelana, constituye un sitio clave por su función ecológica y su vulnerabilidad frente a perturbaciones hidrogeológicas, además, su ubicación colindante con zonas de extracción de salmueras lo convierte en un sector de alto interés para evaluar posibles estrategias de reinyección controlada en el marco de tecnologías *DLE*. Gracias a la actividad minera que se remonta hace ya poco más de 40 años, se encuentra a disposición un catálogo completo de datos hidrogeológicos históricos, provenientes de organismos públicos y privados.

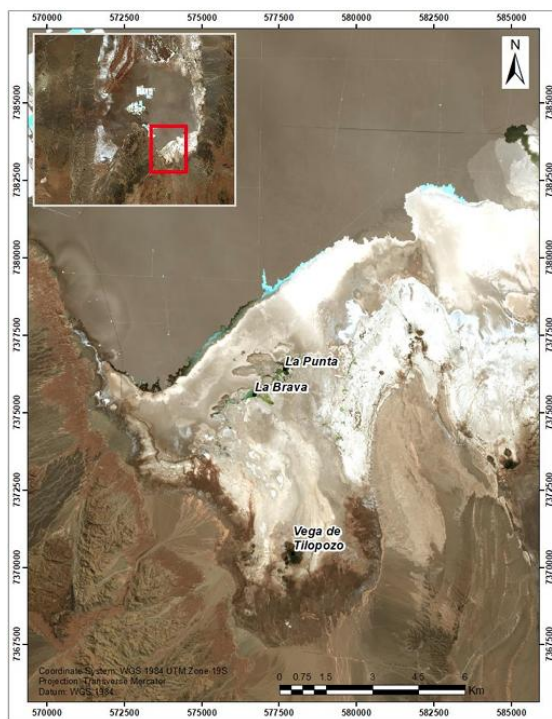


**Figura 0.1:** Detalle de la ubicación y principales componentes del sector Vegas de Tilopozo.  
Adaptado de SQM, 2021.

### 3.1.1. Marco geológico local

El área de Tilopozo se encuentra localizada, principalmente, en las unidades del núcleo y la zona mixta o marginal y abarca una parte menor de los aluviales y la Cordillera de los Andes. Además, colinda con el Cordón de Lila en la parte más oriental (*Figura 0.2*) [48].

El **núcleo** conforma la mayor parte de la superficie del área de estudio y corresponde a la corteza eflorescente del Cuaternario de halita, típica del centro del salar. De color gris, puede contener sulfatos y materia orgánica ocasionales [49]. Su pendiente es prácticamente nula y contiene una superficie muy rugosa.

La **zona mixta** representa las unidades carbonatadas y sulfatadas ubicadas inmediatamente al este del Cordón de Lila. Los sulfatos son los más cercanos al núcleo, con cantidad variable de detritos, que se disponen en forma de una franja de dirección noreste. Lo siguen los carbonatos recientes, la franja evaporítica más extensa del salar. La elevación de los marginales fluctúa entre 2300 y 2312 m.s.n.m. y aloja tanto a las vegas como a los cuerpos lagunares.

Su textura es levemente rugosa y presenta una gradación en cuanto al material detrítico, aumentando hacia la zona aluvial.

Los **aluviales** se ubican al sur del sistema y presentan una suave pendiente hacia el noroeste y agrupa los depósitos propios de estas zonas, provenientes desde la cordillera occidental. Depósitos aluviales y coluviales del Holoceno ocurren rellenando quebradas y en forma de abanicos que se despliegan en dirección del núcleo del salar.

El **Cordón de Lila** corresponde al límite oeste del dominio y alcanza una elevación máxima de 2700 m.s.n.m., que hacia el norte disminuye en altura, desapareciendo bajo el relleno sedimentario del salar. Afloran rocas ígneas y sedimentarias del Paleozoico y unidades volcánicas y plutónicas del Mesozoico y Cenozoico [49].

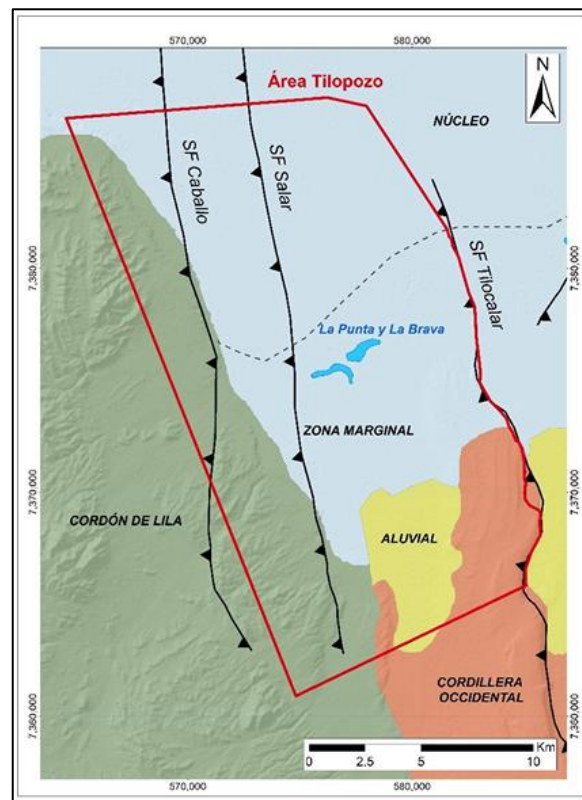


**Figura 0.2:** Unidades geomorfológicas del sector de Tilopozo: Fuente: SQM, 2021a.

Todas estas unidades descritas son cortadas por una serie de fallas inversas subverticales, de persistencia regional. El **sistema de Falla Salar** es el rasgo estructural más importante de toda la cuenca. Está constituido por una serie de fallas inversas, de vergencia este, que definen dos dominios mayores en el

Salar de Atacama y genera un anticlinal de primer orden inmediatamente al oeste del sistema [50].

La Falla Tilocalar se ubica en la península homónima, entre los sistemas Peine y Tilopozo, y se manifiesta en forma de una faja plegada y corrida conformada por fallas subverticales y pliegues antiformes.

### 3.1.2. Estratigrafía

Según el estudio de SQM (2021) [33][48], se cuenta con información estratigráfica de 13 pozos, cuya profundidad varía de 1 metro hasta 340 metros. La distribución de estos, junto con la estratigrafía de alguno de ellos, se presenta en la *Figura 0.3*.

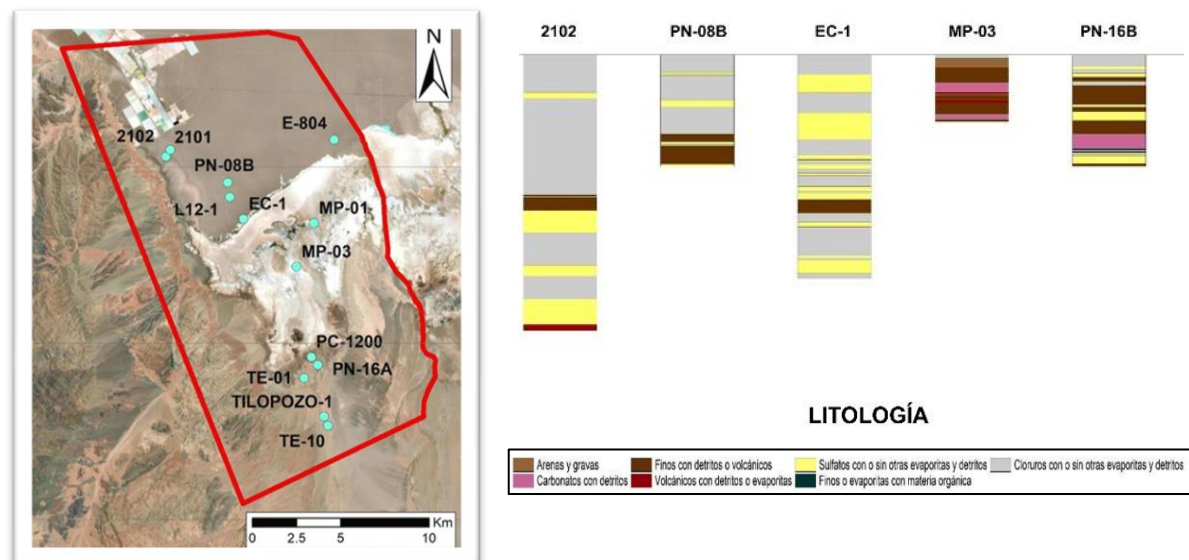


**Figura 0.3:** Ubicación de los sondajes y la estratigrafía de cinco de ellos. Elaborado con datos de SQM, 2021a.

Se puede apreciar que, en los primeros metros, en general, siguen un patrón de intercalación entre cloruros y sulfatos. La discontinuidad de los materiales entre los pozos es compleja de representar con detalle en los modelos numéricos preliminares, por lo que se simplifica la estratigrafía tal como se presenta en la *Figura 0.4* [16].

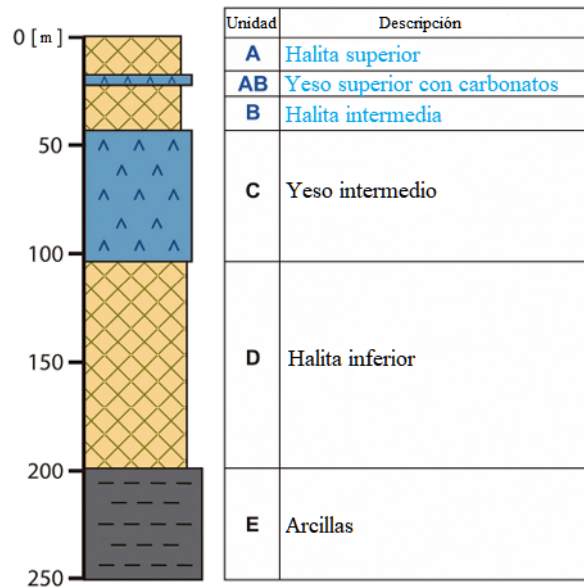


**Figura 0.4:** Perfil estratigráfico típico del núcleo y márgenes del salar. Adaptado de Marazuela et al. (2019a)

Las tres unidades superiores, remarcadas en color celeste, son de suma importancia para los recursos minerales y la sostenibilidad ecológica y se consideran el principal sistema hidrológico. Estas capas constituyen la zona más permeable del salar, el dominio de explotación mineral e interactúan directamente con los lagos de los márgenes. Las unidades C, D y E no desempeñan ningún papel hidrológico de relevancia debido a su menor permeabilidad, llegando en algunos sectores a ser casi nula.

La **unidad A** o acuífero A está compuesta de halita pura con sedimentos y yeso. Su porosidad es mayor que las unidades subyacentes. Los sedimentos son arcillas, limos y arenas de color marrón a rojo. Esta unidad está afectada por las fallas del sector, por lo tanto, en la parte occidental, su espesor oscila entre 14 a 30 metros, mientras que, en la parte oriental, su espesor puede ir desde los 25 hasta 70 metros.

La **unidad AB** se comporta como un acuitardo, es decir, una barrera semipermeable de flujo de agua subterránea. Su composición varía desde arcillas en las zonas marginales hasta yeso con carbonatos en el núcleo. El espesor oscila entre 0,2 a 3 metros, aunque en algunas zonas puede ser de hasta 30 metros.

Para la **unidad B** se vuelve al comportamiento de acuífero. Esta comprende halita con sedimentos y yeso en la parte más occidental. En el sector oriental,

la unidad se compone principalmente de halita pura y lentes de materia orgánica y yeso. El espesor en la parte oriental puede alcanzar longitudes de hasta 400 metros.

### 3.1.3. Hidrogeología

El sistema hidrogeológico del sector Tilopozo forma parte de la dinámica interna de la cuenca endorreica del Salar de Atacama, donde no existe escurrimiento superficial hacia el océano, y el balance hídrico se encuentra fuertemente condicionado por la evaporación y la disponibilidad de recarga subterránea [16]. En este contexto, la recarga del acuífero en este sector ocurre principalmente a través de infiltración de agua meteórica proveniente de las precipitaciones concentradas en las zonas de mayor altitud, por sobre los 4000 m.s.n.m., en el borde sur, alcanzando magnitudes de hasta 160 mm/año. Estas lluvias se asocian principalmente al invierno altiplánico, fenómeno estacional que transporta masas de aire húmedo desde el Océano Atlántico, a través de las cuencas del Amazonas, del río de La Plata y el Gran Chaco, y en menor medida desde el Pacífico [51]. La recarga directa en el núcleo o la zona marginal del salar, por precipitaciones locales, es marginal y episódica, restringida a eventos aislados en los meses invernales.

Una vez infiltrada en la alta cordillera, el agua percola hacia niveles más profundos y alimenta una red de acuíferos volcánicos fracturados, que descargan en dirección noroeste por gradientes hidráulicos regionales hacia el salar. Tilopozo recibe estos flujos subterráneos que descienden desde el macizo andino y atraviesan la zona de abanicos aluviales. La escorrentía superficial generada en la cordillera fluye inicialmente por quebradas, como la Quebrada del Tucucáro o Quebrada Tilocalar, vertientes y ríos temporales, y se infiltra progresivamente en el piedemonte, transformándose en flujo subterráneo y subsuperficial que converge hacia el sistema de lagunas del sector sureste del salar. Todos estos cuerpos no alcanzan a tocar los suelos de la zona mixta [51].

La descarga del sistema se produce fundamentalmente por evaporación, la cual puede dividirse en dos componentes principales: **evaporación superficial directa** desde cuerpos de agua, y **evaporación del nivel freático**. En el caso de Tilopozo, el sistema incluye cuerpos lagunares como Laguna La Punta y Laguna La Brava, que abarcan apenas unas hectáreas, pero

representan zonas activas de evaporación superficial. Esta evaporación alcanza valores máximos estimados de hasta 2190 mm/año [19], lo que constituye una pérdida significativa del sistema. Por otro lado, la evaporación del nivel freático está controlada por la profundidad del agua subterránea respecto de la superficie [52], y disminuye considerablemente cuando esta profundidad supera los 2 metros, alcanzando valores máximos de aproximadamente 180 mm/año bajo condiciones favorables.

La zona de mezcla o interfaz salina, ubicada entre los abanicos aluviales y el núcleo del salar, cumple un rol hidrogeológico fundamental, ya que actúa como una zona de transición donde las aguas dulces de recarga interactúan con la salmuera hipersalina [23]. En Tilopozo, esta interfaz es particularmente activa y compleja, marcada por fuertes gradientes de concentración y densidad, que condicionan el flujo, las reacciones geoquímicas y el almacenamiento de agua en el subsuelo. Esta sensibilidad es crucial en el contexto de estrategias de reinyección de salmueras, dado que cualquier modificación en el régimen hidráulico o geoquímico puede generar respuestas amplificadas en la dinámica del sistema. Bajo la misma línea, Munk et al. (2021) destaca que las lagunas no dependen de la posición de esta interfaz, afirmando que existe una desconexión de ellas con el sistema de salmuera, debido a que se encuentran sostenidas y colgadas de una zona de muy baja conductividad hidráulica, y que son alimentadas tanto por agua de precipitaciones como por descargas laterales [53].

### **3.2. Modelo numérico**

La construcción del modelo numérico constituye una representación simplificada y esquemática del sistema hidrogeológico del sector de estudio, que busca integrar los conocimientos geológicos, hidrológicos e hidroquímicos del área anteriormente expuestos. Esta representación permite definir los límites espaciales del sistema, las principales unidades estratigráficas, los procesos dominantes de flujo subterráneo y transporte de solutos, y las interacciones entre agua dulce, salmueras y evaporación.

El área modelada corresponde a una porción representativa del sistema Tilopozo, en dirección noroeste-sureste, localizada en la parte sur del Salar de Atacama (*Figura 0.5*), caracterizada por una transición activa entre la zona de mezcla en el borde sur, y el núcleo hipersalino del salar al borde norte.

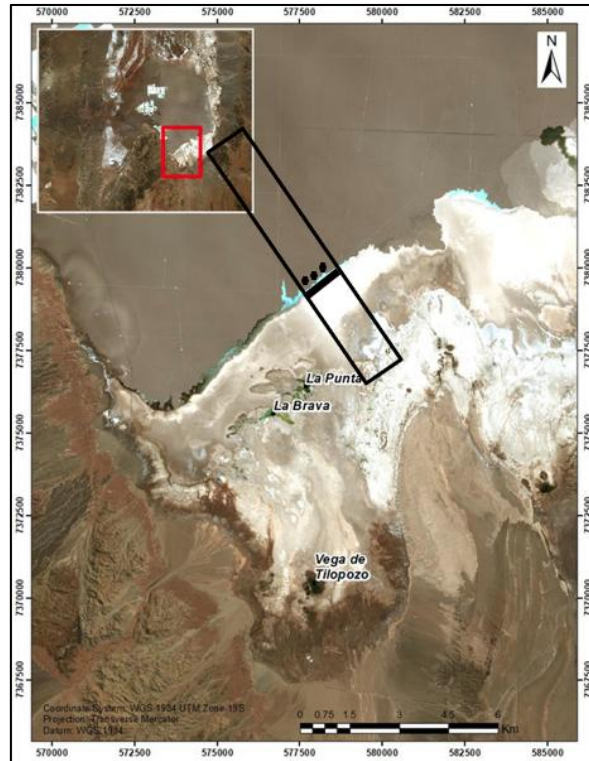


**Figura 0.5:** Ubicación conceptual del modelo numérico. Los puntos al borde del núcleo representan los pozos de reinyección. Adaptado de SQM, 2021a.

El flujo subterráneo, gracias a los resultados presentados por los distintos estudios realizados en el salar, se conceptualiza como un sistema de flujo centrípeto regional, que avanza desde las zonas de recarga en la cordillera hacia el núcleo del salar [17]. Este se ve modificado localmente por los flujos verticales ascendentes que alimentan cuerpos lagunares marginales como La Brava y La Punta. La principal entrada de agua al sistema es la recarga subterránea desde acuíferos volcánicos, mientras que la salida dominante es la evaporación freática, modulada por la profundidad del nivel freático y la salinidad. Para la elaboración de este estudio se ignoran las lagunas del sistema Tilopozo (y por consiguiente la evaporación desde los cuerpos superficiales) ya que no dependen de la posición de la interfaz [53] y permite disminuir los costos computacionales de las simulaciones.

Geoquímicamente, el sistema presenta una transición de aguas de baja salinidad a salmueras concentradas, con un aumento progresivo de iones como  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  y  $\text{Li}^+$ , pasando desde el borde del sistema Tilopozo hasta el núcleo [17]. La zona de mezcla se caracteriza por procesos activos de disolución, precipitación mineral (principalmente yeso y carbonatos), intercambio catiónico, y variación de densidad del fluido, aunque en esta

modelación se asume densidad constante como limitación impuesta por PHAST [41].

Dado el objetivo de evaluar la viabilidad y el impacto geoquímico de una operación conceptual de reinyección de salmuera post-*DLE*, el modelo incorpora pozos de reinyección ubicados en el margen del núcleo del salar, a 200 metros de la zona de mezcla. Se consideran condiciones de borde fijas o de flujo especificado, una geometría idealizada en tres dimensiones, y condiciones geoquímicas iniciales representativas del sector.

### **3.2.1. Geometría y discretización del modelo**

El dominio que se modelará, a diferencia de los estudios revisados en la Sección 2, estará conformado por un bloque tridimensional del sistema, alineado con el gradiente hidráulico regional, desde la zona de recarga en los bordes cordilleranos hacia el núcleo del salar (*Figura 0.6*). Abarca una extensión de 10000 metros de largo (eje *x*), 1000 metros de ancho (eje *y*) y 300 metros de profundidad (eje *z*), extendiendo las dimensiones del estudio de Leonard Zourek de 2020. El límite superior del modelo corresponde a la elevación promedio de la zona, de unos 2300 m.s.n.m.

La discretización espacial del dominio se realizó mediante una malla regular de celdas rectangulares, acorde con la estructura de cálculo de PHAST. El modelo fue dividido en:

- 101 celdas en la dirección *x*, con un tamaño uniforme de 100 metros por celda.
- 51 celdas en la dirección *y*, con un tamaño también uniforme de 10 metros por celda.
- Con el fin de representar mejor el comportamiento subterráneo, en el eje *z* la distribución de las celdas no fue uniforme. Para la halita superior e intermedia, se tienen tamaños de 10 metros por celda y el acuitardo fue representado por una única celda de 30 metros, dando un total de 29 celdas en la dirección vertical.

Esto resulta en un total de 149379 celdas activas ( $101 \times 51 \times 29$ ), lo cual ofrece un balance adecuado entre resolución espacial y eficiencia computacional, permitiendo representar fenómenos de interés sin comprometer la estabilidad numérica debido a oscilaciones ni el tiempo de simulación [47].

La discretización vertical fue diseñada para capturar la estructura estratigráfica del sistema, diferenciando tres grandes unidades: la capa superficial asociada a sedimentos evaporíticos y costras de halita parcialmente saturadas, un acuitardo intermedio compuesto por arcillas salinas y yeso, y un nivel inferior más permeable, correspondiente a halita pura. La profundidad de 300 metros fue definida como límite inferior del modelo, en contacto con el basamento, asumiendo que por debajo de este nivel el flujo vertical y las interacciones químicas asociadas a la reinyección son despreciables para el horizonte temporal considerado.

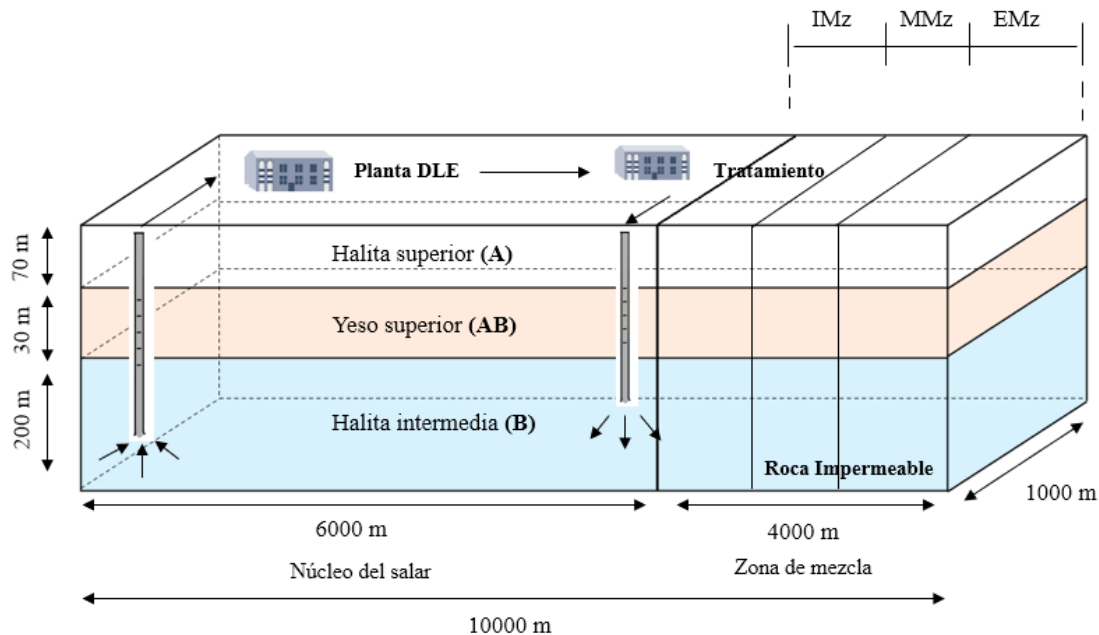


**Figura 0.6:** Esquema representativo del modelo numérico con sus dimensiones, unidades hidrogeológicas y los pozos de extracción y reinyección.

El periodo de simulación abarca un total de 5 años, con una etapa previa, la cual fue dividido en dos partes esenciales. La primera simulación corresponde a un periodo de 1 año en régimen estacionario, sin actividad extractiva y luego incluyendo esta, destinado a establecer las condiciones iniciales de partida para el régimen transitorio. La segunda etapa conforma los 5 años del horizonte de simulación, incluyendo los pozos de reinyección y con pasos de tiempo a determinar según el número de Courant.

### 3.2.2. Parámetros hidráulicos

Los parámetros hidráulicos utilizados en el modelo fueron definidos a partir del análisis del marco conceptual del sistema Tilopozo y basados en los valores reportados por Marazuela et al. (2019b) [30], quien recopiló e integró resultados de ensayos de bombeo, pruebas de permeabilidad y estudios de caracterización física realizados previamente por empresas operadoras y centros de investigación (SQM, Rockwood Lithium y el Instituto de Diagnóstico Ambiental y Estudios del Agua del CSIC) y luego los calibró mediante modelación inversa con el código de estimación de parámetros PEST.

La conductividad hidráulica ( $K$ ) es el parámetro más influyente en las simulaciones de flujo subterráneo, pues controla la facilidad con la que el agua se mueve a través del medio poroso. En el área de estudio, los valores varían significativamente según la unidad en la que se haga la prueba de ensayo. En la parte del núcleo, para la unidad A o halita superior, se adoptó un valor promedio de 300 m/d. El yeso intermedio, con comportamiento de acuitardo, fue configurado con un valor de 0.01 m/d. En la unidad B, correspondiente a halita pura intermedia, se adopta un valor de 0.1 m/d. Pasando a la zona mixta, para la halita superior se tiene un valor de 190 m/d, valor mayor a las dos unidades inferiores, donde se tiene 5 m/d para el acuitardo de yeso y 20 m/d para la halita intermedia en profundidad.

La porosidad efectiva ( $\phi$ ) determina el volumen de agua disponible para el flujo y transporte. Se definieron los siguientes valores para las unidades involucradas: 0.3 para la halita superior y 0.1 para las dos unidades siguientes (AB y B).

El almacenamiento específico ( $S_s$ ) es una propiedad de los acuíferos que describe la cantidad de agua que libera o almacena por unidad de volumen ( $m^3$ ) y por unidad de cambio en la carga hidráulica (m). Resulta relevante bajo condiciones transitorias, especialmente para simular el efecto del bombeo o de reinyección. Los valores calibrados obtenidos por Marazuela van desde  $0.011 m^{-1}$  para la halita superior, núcleo y zona mixta y  $1 \times 10^{-4} m^{-1}$  con  $1 \times 10^{-5} m^{-1}$  para las dos unidades inferiores, respectivamente.

Para la simulación del transporte de solutos, se incorporan valores típicos de dispersividad, tomando como referencia los rangos sugeridos en la literatura para sistemas similares y ajustados a las dimensiones del modelo [54]. La

dispersividad longitudinal se estableció en 100 metros y la transversal en 10 metros. Estos valores buscan representar el alargamiento del frente salino y la atenuación transversal en la zona de mezcla y en condiciones de reinyección.

Todos los valores de los parámetros hidráulicos se presentan esquemáticamente en la *Figura 0.7*. Por su parte, el coeficiente de difusión molecular queda fijado en  $1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ , valor típico en iones comunes ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{Li}^+$ ) en agua a temperatura ambiente. Esta propiedad es el movimiento de solutos debido al gradiente de concentración, independiente del flujo de agua. Es el mecanismo dominante cuando el transporte ocurre en poros pequeños o materiales de muy baja permeabilidad, como arcillas o halita compacta [25]. Los valores de tortuosidad son propios de sistemas salinos [55] quedando en 3 para las unidades del núcleo y 2.5 para las 3 unidades restante de la zona mixta.

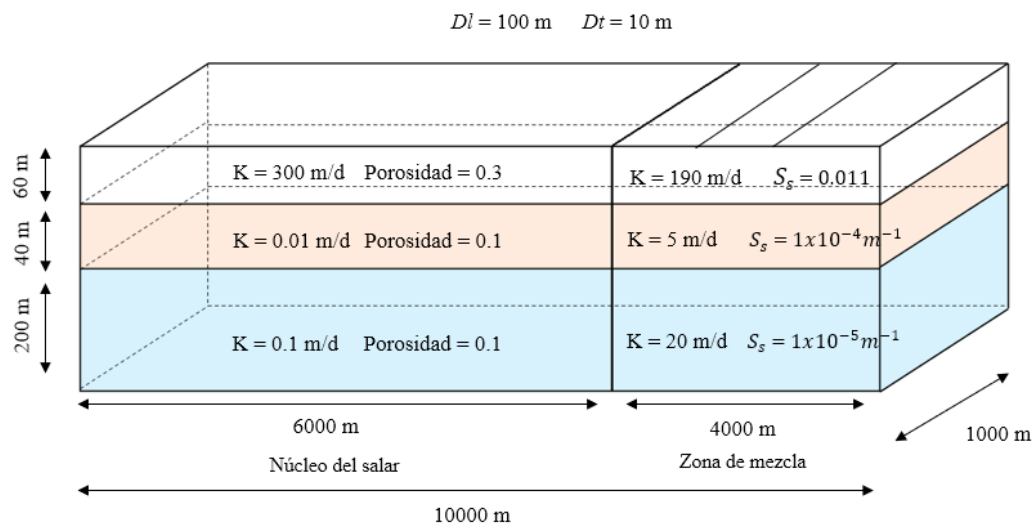


**Figura 0.7:** Propiedades hidráulicas utilizadas en el modelo tridimensional.  $Dl$  y  $Dt$  representan la dispersividad longitudinal y transversal respectivamente.

### 3.2.3. Condiciones de borde

Las condiciones de borde implementadas en el modelo representan una versión simplificada de los procesos de entrada y salida de flujo del acuífero de la zona, es decir, del balance hídrico correspondiente. No se consideran los cuerpos lagunares con la respectiva evaporación en lámina libre, las escorrentías.

Los componentes principales del balance hídrico se pueden relacionar de la siguiente manera:

$$\Delta S = (P + R_{ls} + Rein) - (Ev + E_m) \quad (3.1)$$

Donde  $\Delta S$  es el cambio en el almacenamiento en un intervalo de tiempo,  $P$  la recarga directa por precipitaciones,  $R_{ls}$  la recarga subterránea lateral,  $Ev$  la descarga por evaporación freática,  $E_m$  es la representación conceptual de las extracciones mineras y  $Rein$  el componente de la reinyección. La *Figura 0.8* reúne todos estos elementos de manera gráfica.

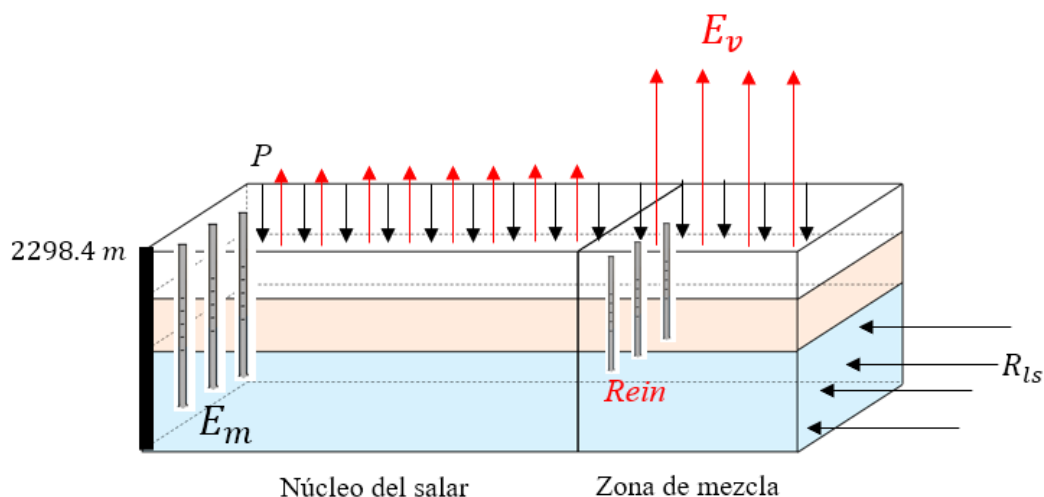


**Figura 0.8:** Esquema representativo de las condiciones de borde impuestas en el modelo numérico.

Se define una condición especial de Dirichlet en el borde norte del modelo, en la cara que conceptualmente da hacia el núcleo, estableciendo un valor estático para la variable en la frontera. Se fija el nivel freático mediante el paquete *SPECIFIED\_HEAD\_BC* en 2298.4 metros, valor obtenido a través de los distintos pozos de observación que tienen las compañías en el sector y que responde al descenso en los niveles por la actividad antropogénica [48]. De esta manera, la simulación efectúa el ingreso o extracción de salmuera a través del borde norte para cumplir con este valor fijo. Debido a que los flujos relevantes son de componente vertical y en dirección hacia el núcleo del salar, las caras largas laterales, al igual que la parte inferior (el contacto con el basamento), son impermeables. A continuación, se desarrollan todas las condiciones de borde implementadas en el modelo.

### 3.2.3.1. Recarga por precipitaciones

La mayor fuente de recarga proviene de las precipitaciones en altura, por sobre los 4000 m.s.n.m., sin embargo, hay eventos puntuales sobre la zona de mezcla y el núcleo que no se pueden ignorar a la hora de establecer las condiciones de borde de cualquier modelo hidrológico en el sector [16]. Gracias a distintas estaciones de medición meteorológicas, es posible caracterizar las precipitaciones sobre toda la cuenca del Salar de Atacama [48]. La distribución de estas se presenta en la *Figura 0.9*. De dicha ilustración se observa que, el promedio anual para el periodo 1986 – 2019 de agua caída en el sistema en estudio varía entre 14 y 30 mm/año aproximadamente. De esta manera, la recarga por precipitaciones que caen sobre el dominio modelo se representa como condición de contorno de tipo Neumann, es decir, con una tasa constante anual con un valor de 20 mm/año, al cual se le resta la detención, del 35%. Esta corresponde al porcentaje de las precipitaciones que no alcanza a llegar al acuífero y se evapora en el proceso. El valor final de la recarga queda en 13 mm/año.

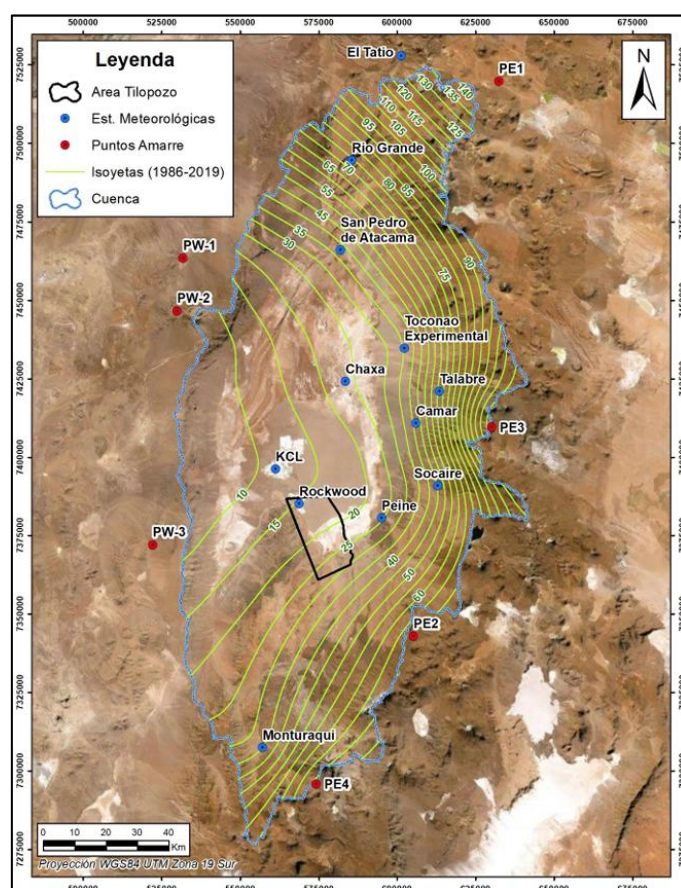


**Figura 0.9:** Distribución de precipitación promedio anual para la cuenca del Salar de Atacama.  
Fuente: SQM, 2021a.

### 3.2.3.2. Descarga por evaporación

La evaporación en el Salar de Atacama ocurre en función de la profundidad del nivel freático (evaporación freática) [19][20]. Las tasas más elevadas de evaporación ocurren en la zona de mezcla, donde el nivel freático se encuentra muy cerca de la superficie. En el núcleo del salar, a pesar de que el nivel freático se ubica a mayor profundidad, la porosidad de la costra de halita favorece el ascenso capilar del agua, lo que permite mantener una evaporación significativa en áreas extensas, aunque de menor intensidad.

Para representar este proceso, se emplea la siguiente expresión exponencial que relaciona la tasa de evaporación con la profundidad del nivel freático [52]:

$$E = E_0 * e^{(-b*z)} \quad (3.2)$$

Donde  $E$  es la evaporación efectiva (mm/d);  $E_0$  corresponde a la tasa de evaporación potencial (mm/d);  $z$  es la profundidad del acuífero (m) y  $b$  es un parámetro que se puede obtener ajustando datos experimentales con la forma linealizada de la ecuación 3.2. Tal como se vio en el *Marco teórico*, distintos autores han tenido como finalidad caracterizar la evaporación en la cuenca completa, por ejemplo, Marazuela en 2020, a través de datos obtenidos de distintos lisímetros, ajustaron estos valores empíricos obteniendo una curva como la mostrada en la *Figura 0.10* [19]. Los mayores valores de evaporación, dados por una tasa potencial de 5.84 mm/d, se alcanzan en los cuerpos lagunares, sin embargo, dado que el presente modelo no considera la evaporación superficial directa, este componente ha sido excluido del balance.

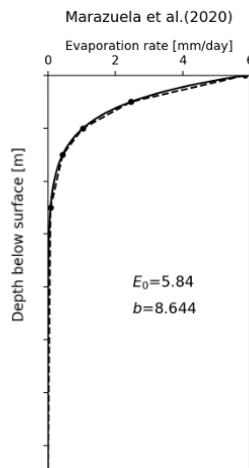


**Figura 0.10:** Relación exponencial entre la evaporación y la profundidad del nivel freático con los valores de ajuste de Marazuela. Modificado de Zourek, 2020.

En el marco de PHAST, donde no es posible implementar de forma directa una ecuación dinámica dependiente del nivel freático como condición de borde, la evaporación freática fue aproximada mediante la asignación de múltiples condiciones de flujo vertical descendente (*FLUX\_BC*) distribuidas a diferentes profundidades del dominio. Este enfoque permite representar el decrecimiento exponencial de la evaporación con la profundidad del acuífero, dado que el modelo toma la tasa correspondiente al punto inmediatamente inferior al nivel freático en cada celda. La *Figura 0.11* esquematiza esta aproximación. Para la zona de mezcla, se asignaron tasas decrecientes desde la superficie hacia los 1.5 m de profundidad: 180 mm/año (~0 m), 100 mm/año (0.5 m), 40 mm/año (1.0 m), 10 mm/año (1.25 m) y 0 mm/año ( $\geq 1.5$  m).

En el núcleo del salar, en cambio, se adoptó una tasa fija de evaporación de 20 mm/año, representativa de la condición general de esa zona, sin necesidad de establecer una estratificación vertical [20].

Este tratamiento permite simular de manera realista el efecto de la evaporación en función de la posición del nivel freático en un entorno árido y altamente salino como Tilopozo.

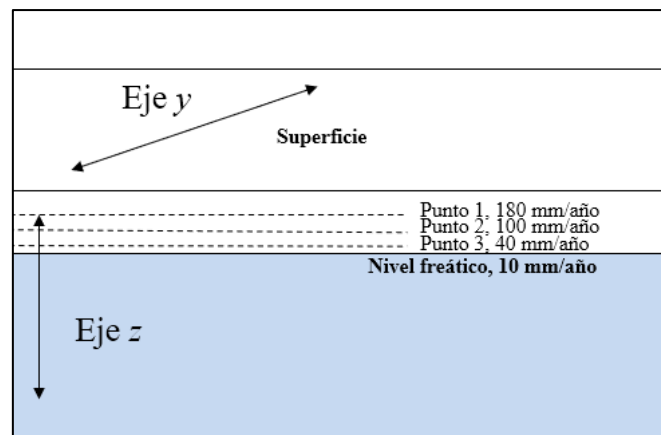


**Figura 0.11:** Representación esquemática del funcionamiento de la evaporación por puntos en PHAST.

### 3.2.3.3. Recarga subterránea lateral

Todas las precipitaciones que ocurren en las alturas de la Cordillera de los Andes se infiltran y llegan al acuífero subterráneamente. Este flujo constituye

la mayor cantidad de ingreso de agua dulce al sistema. Esta recarga lateral es más significativa en el extremo sur del salar y disminuye hacia el norte [51].

Existen dos formas de poder implementarla en el modelo, la primera es fijar el nivel hidráulico en el borde sur del modelo, la cara que conceptualmente da hacia la zona de mezcla. Como se explica al inicio del apartado, el software haría ingresar agua con tal de cumplir con el nivel predeterminado. La segunda y más realista, es con el paquete *FLUX\_BC*, sobre todos los nodos al borde de la halita intermedia. De esta forma, la persona usuaria controla el flujo que ingresa sobre el modelo, permitiéndole responder dinámicamente a cambios en el almacenamiento, conductividad y recarga, sin anular el gradiente hidráulico natural de la zona. Esta opción fue aplicada específicamente sobre los nodos ubicados en el límite de la halita intermedia.

La estimación de la recarga subterránea depende de cada persona autora y del método que utilicen. Por ejemplo, SQM utiliza los datos de las precipitaciones en la cordillera y aluviales y, a través de un cálculo que utiliza distintos coeficientes de infiltración y extracción, llegan a los valores deseados de la recarga lateral [48]. Otro método, aunque menos realista, es considerar el balance hídrico, según la ecuación 3.1, cercano a cero, y tomando en cuenta solo los procesos naturales de la cuenca, es decir, quitando de la ecuación los valores de extracción y reinyección. Así, la condición queda de la siguiente manera:

$$R_{ls} = E_v - P \quad (3.3)$$

Arrojando un valor final de 187 mm/año. Este valor se aumenta a medida que implementamos las simulaciones con pozos de extracción de salmuera.

### **3.2.3.4.Extracciones**

En estricto rigor, sobre el sistema Tilopozo no ocurren extracciones directas de salmueras. Los pozos están ubicados sobre el núcleo del salar, hacia el sur y suroeste de la cuenca. Las instalaciones de Albemarle se encuentran próximas al sector de estudio, aproximadamente a 11 kilómetros [56]. Sin embargo, el descenso en los niveles a causa de esto ocurre sobre todos los sistemas de interés, por lo que representar la minería del litio es parte esencial de cualquier modelo numérico que evalúe la reinyección controlada. Así es como se manifiesta conceptualmente la extracción a través de 4 pozos ubicados justo al lado del borde norte mediante el paquete *WELL*, a unos 200

metros de profundidad y con un diámetro típico operacional de 0.445 m (véase *Figura 0.8*).

El caudal de extracción, según los datos más recientes por parte de SQM envueltos en la resolución ambiental modificada el año 2021 (RCA 226/2006), alcanza valores de 1256 L/s, caudal que debería seguir la tendencia de disminución hacia los años siguientes, llegando a 820 L/s para el año 2030 [37]. Por parte de Albemarle, donde sus instalaciones cuentan con una cantidad menor de pozos, el caudal de extracción autorizado que poseen es de 442 L/s [55]. En ninguno de los dos casos se tiene la cantidad de pozos exactas operando en el salar al ser información privada, por lo que el caudal unitario es desconocido. Estos valores de extracción son imposibles de fijar en un modelo con las dimensiones establecidas con anterioridad al presentar errores numéricos en la simulación. Se fija, de este modo, un caudal de 30 L/s por pozo.

### **3.2.3.5. Reinyección**

La reinyección es modelada desde 1 L/s hasta los 15 L/s (con incrementos de 1 L/s) como caudal unitario de ingreso, en cuatro pozos ubicados en el núcleo, a 200 metros del límite de la zona de mezcla con el paquete *WELL*, a una separación de 150 metros entre cada uno. La principal razón es la sensibilidad hidrológica y ambiental de la interfaz salina ya que el núcleo prácticamente tiene el comportamiento de un sistema cerrado aislado de la zona de mezcla [23]. Además, debido a la dirección de los flujos de baja velocidad, esta salmuera reinyectada sería devuelta a los niveles menos profundos en los bordes del salar, evitando una posible dilución [38] (véase *Figura 2.3* y *Figura 2.4*). La profundidad queda establecida en 130 metros, con el mismo diámetro operacional de los pozos de extracción.

### **3.2.4. Condiciones iniciales y módulo químico**

El conjunto de condiciones iniciales constituye un paso fundamental en la construcción de modelos transitorios de flujo y transporte, pues establece el estado de partida del sistema antes de la intervención (en este caso, la reinyección). En este estudio, las condiciones iniciales se establecieron para

dos componentes claves: la distribución del nivel freático y la composición química del sistema.

La superficie piezométrica inicial de 2299 metros fue definida a partir de datos disponibles en reportes públicos y literatura científica, con base en campañas de monitoreo históricas [33][57].

La simulación geoquímica en PHAST requiere de un módulo químico predefinido, el cual describe las especies iniciales en solución, reacciones acuosas, equilibrio con fases minerales, complejos iónicos, mecanismos de intercambio y/o reacciones superficiales. Este módulo es construido externamente utilizando PHREEQC, el software geoquímico de referencia desarrollado por el *USGS*, y luego es exportado e incorporado al modelo hidrodinámico en PHAST.

Se empleó el bloque *SOLUTION\_MASTER\_SPECIES* para definir los elementos principales (Li, Na, K, Mg, Ca, Cl, SO<sub>4</sub> y HCO<sub>3</sub>), y *SOLUTION\_SPECIES* para incluir las reacciones de disociación y formación de complejos acuosos relevantes. Estas definiciones corresponden a especies comúnmente presentes en salmueras andinas [17].

Catalina Ahumada en el año 2015, en el marco de su trabajo de tesis de Magister, realizó una caracterización hidroquímica de las aguas del sector sur del Salar de Atacama a partir de análisis de resultados químicos de una serie de campañas de muestreo mensual que llevó a cabo entre febrero y mayo de 2013 [57]. La mayoría de los puntos visitados estaban ubicados entre el sector de Tilopozo y Peine y arrojaron resultados de pH, temperatura, alcalinidad y concentraciones iniciales de los iones disueltos en la salmuera. Tomando como base estos resultados, se definieron distintas soluciones (mediante *SOLUTION*) representativas del núcleo, sistema Tilopozo y borde aluvial (***¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.***), verificando el balance iónico, densidad y especiación mediante cálculos independientes en PHREEQC (*Tabla 3.1*). Adicionalmente, con el mismo bloque, se establecieron composiciones típicas de precipitaciones y aguas de recarga en la cuenca [17]. Para el caso de la solución a reinyectar, se trabaja bajo el supuesto que el proceso *DLE* extraerá el 95% del litio sin modificar los demás elementos. A cada *SOLUTION* se le asigna un número identificativo.

**Tabla 3.1:** Concentraciones iniciales de los iones principales usados en las distintas zonas y condiciones de borde impuestas. Elaboración propia con datos de Ahumada, 2015.

| Zona             | Núcleo   | Tilopozo | Borde aluvial | Precipitaciones | $R_{ls}$ | Reinyección | Unidad            |
|------------------|----------|----------|---------------|-----------------|----------|-------------|-------------------|
| pH               | 7.2      | 7.5      | 7.1           | 4.6             | 7.0      | 7.0         |                   |
| $\rho$           | 1.23     | 1.23     | 1.09          | 1.0             | 1.01     | 1.21        | kg/m <sup>3</sup> |
| Temperatura      | 22.6     | 19.2     | 21.5          | 25.0            | 18.0     | 19.0        | °C                |
| Na               | 109059.7 | 5443.2   | 692.8         | 0.441           | 100      | 109059.7    | mg/L              |
| K                | 17384.6  | 793.9    | 85.1          | 0.106           | 10       | 17384.6     | mg/L              |
| Mg               | 8294.3   | 564.0    | 83.8          | 0.213           | 30       | 8294.3      | mg/L              |
| Ca               | 503.3    | 213.6    | 145.8         | 0.584           | 40       | 503.3       | mg/L              |
| Cl               | 189864.1 | 12837.6  | 1319.8        | 0.436           | 150      | 189864.1    | mg/L              |
| SO <sub>4</sub>  | 12738.2  | 2984.1   | 421.3         | 1.3             | 20       | 12738.2     | mg/L              |
| HCO <sub>3</sub> | 715.2    | 468.2    | 476.6         | 3.1             | 210      | 715.2       | mg/L              |
| Li               | 763.0    | 113.3    | 19.9          |                 | 1.1      | 38.15       | mg/L              |

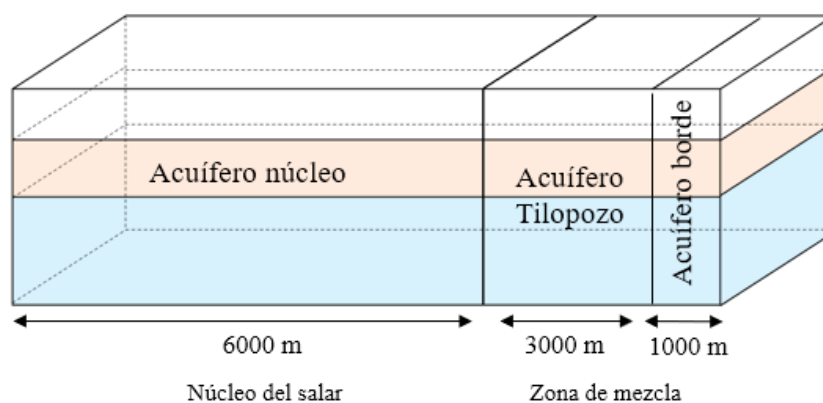


**Figura 0.12:** Ubicación conceptual de los acuíferos en el modelo tridimensional. Elaboración propia.

Mediante los bloques *PHASES* y *EQUILIBRIUM\_PHASES*, se incorporaron minerales relevantes como halita (NaCl), calcita (CaCO<sub>3</sub>), yeso (CaSO<sub>4</sub>•2H<sub>2</sub>O), dolomita ([CaMg(CO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>]), silvita (KCl) y magnesita (MgCO<sub>3</sub>). Su inclusión permite simular la posible precipitación o disolución en función de la sobresaturación durante procesos de mezcla o reinyección. En adición, se asume que las soluciones se encuentran en equilibrio con el dióxido de carbono atmosférico.

A través de *EXCHANGE\_MASTER\_SPECIES*, *EXCHANGE\_SPECIES* y *EXCHANGE*, se simulaban mecanismos de intercambio catiónico sobre matrices arcillosas, permitiendo modelar procesos de retención diferencial de iones como Ca<sup>2+</sup> y Li<sup>+</sup> por sitios ocupados por X<sup>-</sup> (como Cl<sup>-</sup>). En caso de ser

necesario, también se puede agregar un bloque *SURFACE* para adsorción específica, aunque en este estudio se priorizó el intercambio. La adsorción se modela mediante especies superficiales que reaccionan con cationes disueltos. Por ejemplo:



Donde Surf\_wOH representa un grupo funcional superficial (como un sitio en óxido de hierro o aluminio) que reacciona con litio para formar un complejo adsorbido (Surf\_wOLi), liberando un protón. Esta representación sigue el modelo de superficie constante (CD-MUSIC o DLM), donde cada superficie puede adsorber selectivamente iones según su afinidad química. La *Tabla 3.2* presenta un resumen de las principales reacciones consideradas

**Tabla 3.2:** Principales reacciones consideradas a través del módulo químico además de los procesos de intercambio y adsorción. El log K proviene de la base de datos de Pitzer.

| Tipo                           | Reacción                                                                                                               | Log K (a 25°C) |
|--------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------|
| Precipitación-Disolución       | $\text{NaCl}_{(s)} \leftrightarrow \text{Na}^+ + \text{Cl}^-$                                                          | 1.582          |
|                                | $\text{CaSO}_{4(s)} \cdot 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{SO}_4^{2-} + 2\text{H}_2\text{O}$ | -4.519         |
|                                | $\text{CaCO}_{3(s)} \leftrightarrow \text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-}$                                                 | -8.406         |
|                                | $\text{KCl}_{(s)} \leftrightarrow \text{K}^+ + \text{Cl}^-$                                                            | 0.9            |
| Complexación                   | $\text{Mg}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} \leftrightarrow \text{MgCO}_3$                                                      | 2.928          |
|                                | $\text{Ca}^{2+} + \text{CO}_3^{2-} \leftrightarrow \text{CaCO}_3$                                                      | 3.151          |
| Intercambio( <i>EXCHANGE</i> ) | $\text{Li}^+ + \text{X}^- \leftrightarrow \text{LiX}$                                                                  | -0.08          |
| Adsorción( <i>SURFACE</i> )    | $\text{Surf\_wOH} + \text{Li}^+ \leftrightarrow \text{Surf\_wOLi} + \text{H}^+$                                        | 1.5            |

Finalmente, se utilizó el comando *SELECTED\_OUTPUT* para generar un archivo *.chem.dat* compatible con PHAST. Este archivo contiene toda la información termodinámica y cinética necesaria para resolver las ecuaciones de transporte reactivo en el modelo tridimensional.

El módulo químico exportado fue vinculado directamente en el modelo PHAST mediante la instrucción *CHEMISTRY\_IC* para el acuífero y *associated\_solution* para los flujos, asegurando consistencia entre el componente geoquímico y el modelo físico-hidráulico. Por ejemplo, a la hora de extraer salmuera en el núcleo con la función *WELL*, su solución asociada es la salmuera del núcleo, con su número identificativo correspondiente.

La base de datos utilizada es *Pitzer.dat*, desarrollado específicamente para describir con precisión el comportamiento de soluciones de alta fuerza iónica, como las salmueras típicas de sistemas evaporíticos. Este modelo es superior al modelo de Debye-Hückel (usado en bases como *phast.dat* o *wateq4f.dat*) cuando se trata de calcular la actividad química en medios altamente salinos [28].

### 3.3. Escenarios de simulación

Con el objetivo de evaluar el comportamiento hidrogeoquímico del sistema frente a diferentes condiciones hidrodinámicas y actividades antrópicas, se desarrollaron una serie de escenarios de simulación en PHAST. Cada uno de estos casos permite aislar efectos específicos sobre el sistema, tanto en estado estacionario como transitorio, incorporando gradualmente los componentes de la extracción minera, reinyección y transporte reactivo. Los escenarios definidos son los siguientes (*Figura 0.13*):

1. Se define el caso base como el sistema en régimen natural, sin actividad humana. Se simula en condiciones de equilibrio hidráulico, en régimen estacionario, a fin de establecer la línea base del acuífero. No se considera aún el transporte de especies químicas ni procesos transitorios.
2. A partir del escenario anterior, incorporando el módulo químico, se realizan simulaciones del caso base con flujo estacionario y transporte advectivo y dispersivo de especies químicas representativas, sin considerar aún reacciones de intercambio y adsorción.
3. Simulación con actividad antropogénica modelando la extracción continua de salmuera durante un periodo de tiempo extendido de cinco años bajo condiciones transientes, sin considerar la reinyección. Este escenario permite cuantificar el abatimiento del nivel freático y la redistribución del flujo.
4. Simulación incorporando el escenario anterior, ahora incluyendo la reinyección, con los cuatro pozos ubicados a 200 metros de la zona de mezcla. Los saltos de caudales unitarios van desde 1 L/s hasta los 15 L/s, permitiendo cuantificar la recuperación del nivel freático y el efecto sobre los flujos subterráneos.
5. Por último, se realizan simulaciones de reinyección de salmueras con transporte de reactivos analizando el efecto que tiene el ingreso sobre la

redistribución de las concentraciones y la modificación sobre el índice de saturación.

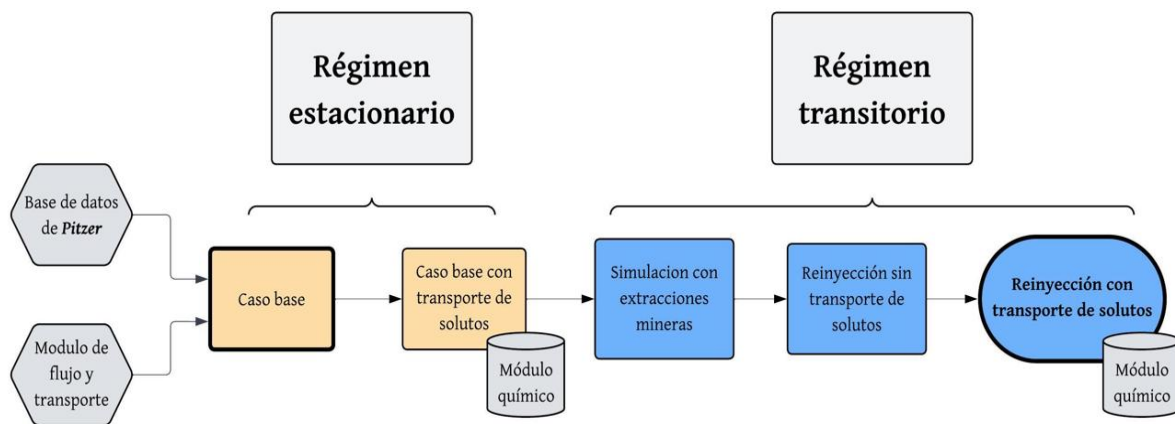


**Figura 0.13:** Diagrama secuencial de los escenarios de simulación implementados.

Cada uno de estos escenarios fue diseñado con base en condiciones representativas del sistema Tilopozo, y su implementación se realizó secuencialmente para garantizar la estabilidad numérica y la interpretación aislada de los resultados.

### 3.4. Alcances

El modelo desarrollado constituye una herramienta conceptual y numérica que permite evaluar el comportamiento del sistema acuífero en una porción representativa del Salar de Atacama. Este modelo incorpora la simulación acoplada del flujo subterráneo en régimen estacionario y del transporte reactivo de especies químicas, considerando procesos de evaporación superficial, recarga meteórica y subterránea, así como reinyección de salmueras industriales. Los principales alcances del modelo se pueden resumir en los siguientes puntos:

- Evaluación del impacto geoquímico de fuentes de agua dulce y salmueras de reinyección sobre el núcleo del sistema, permitiendo analizar los gradientes de concentración generados por estos flujos.
- Inclusión de procesos de precipitación y disolución mineral en equilibrio, particularmente para fases comunes en salares como halita, yeso, calcita y dolomita.

- Simulación del transporte reactivo de especies iónicas relevantes para el sistema, tales como  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Mg}^{2+}$  y  $\text{SO}_4^{2-}$ , considerando la interacción con fases minerales y procesos de sorción e intercambio iónico.
- Representación del campo de flujo en régimen permanente, mediante la aplicación de condiciones de borde tipo Dirichlet y Neumann, lo que permite reproducir la dirección y magnitud del flujo hidráulico en el dominio modelado.

En conjunto, el modelo permite identificar zonas potenciales de interacción entre diferentes tipos de aguas y evaluar su evolución espacial, aportando insumos valiosos para la gestión sostenible del recurso hídrico y la evaluación de impactos por operaciones extractivas.

### 3.5. Supuestos y limitaciones

Si bien el modelo constituye una representación razonable del sistema conceptual, presenta una serie de limitaciones inherentes tanto al enfoque numérico adoptado como a las simplificaciones necesarias para su implementación. Estas limitaciones se detallan a continuación:

- Se asume que las especies presentes corresponden solamente a los complejos formados a partir de la asociación de los cationes litio, magnesio, sodio, potasio y calcio con los aniones cloruro, sulfuro, carbonato y bicarbonato. Se ignoran las posibles asociaciones con los iones minoritarios que se pueden hallar en el salar como boro, bromo o sílice.
- Debido a una limitación impuesta por PHAST, se asume un sistema con densidad constante y por lo tanto se ignoran los fenómenos de transporte de calor y de flujo impulsado por variaciones en la densidad del fluido.
- Se considera el salar como un acuífero no confinado, anisotrópico y homogéneo.
- La imposición de condiciones hidráulicas constantes en un extremo del modelo (Dirichlet) garantiza la estabilidad del flujo, pero limita la posibilidad de representar transientes naturales o forzantes externos que pudieran modificar los gradientes hidráulicos con el tiempo.
- La evaporación se modeló como un flujo de salida forzado en la superficie, sin incorporar funciones que dependan explícitamente de variables

climáticas o del contenido salino, lo que podría subestimar los efectos reales de este proceso en zonas someras.

- Las constantes de equilibrio y los parámetros de intercambio y sorción fueron extraídos de literatura, sin una calibración específica al sistema local. Esto introduce un nivel de incertidumbre respecto a la fidelidad de las concentraciones simuladas.
- El modelo no incluye la simulación directa de pozos de extracción industrial, lo que limita su capacidad para representar escenarios reales de explotación y sus impactos hidráulicos.

## 4. Resultados y discusiones

### 4.1. Caso base

En la situación base, sin considerar procesos de extracción ni reinyección, el modelo fue evaluado bajo condiciones de borde e iniciales impuestas, resolviéndose en régimen estacionario para establecer el estado de equilibrio hidrodinámico del sistema. Bajo esta configuración, se aplicó una condición de contorno de carga hidráulica constante en el borde izquierdo del dominio, representando conceptualmente la zona de mezcla entre agua dulce y salmuera. Como resultado, se obtuvo un patrón de flujo coherente con lo esperado para este tipo de entorno: el agua subterránea fluye desde la zona de mezcla hacia el núcleo del salar, en dirección general oeste-este (*Figura 4.1*).

Este comportamiento es consistente con las observaciones reportadas por Boutt et al. (2016) y Marazuela et al. (2019b), donde se destaca que el gradiente hidráulico es más pronunciado en la zona de mezcla y se intensifica al ingresar al núcleo, debido a la diferencia en las propiedades hidráulicas entre ambas unidades [30][57]. En particular, la halita superior del núcleo presenta una conductividad hidráulica más elevada (300 m/d) en comparación con los materiales correspondientes a la zona de mezcla (190 m/d), lo que contribuye a concentrar y acelerar el flujo hacia el centro del salar.

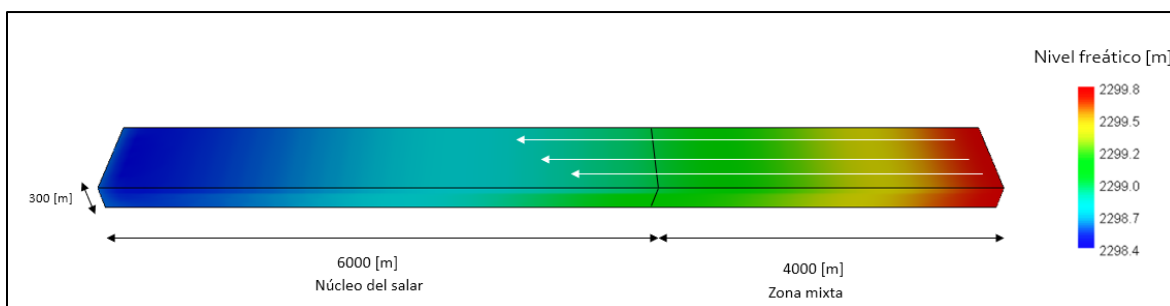


**Figura 4.1:** Vista del nivel freático en todo el modelo en régimen estacionario.

Durante la fase de resolución, el modelo alcanzó la convergencia numérica utilizando el solucionador de flujo en estado estacionario. El comportamiento del proceso iterativo se analizó mediante la información entregada por los comandos *PRINT\_INITIAL* y *PRINT\_FREQUENCY*, los cuales permitieron

monitorear tanto la evolución del nivel hidráulico como el campo de velocidades. En las primeras iteraciones (1 a 20), partiendo desde un nivel inicial uniforme de 2299 metros, se observaban diferencias considerables entre pasos de tiempo, con cambios en el nivel freático de hasta 0.8 metros y un flujo residual de aproximadamente  $2 \text{ m}^3/\text{día}$  por nodo. Sin embargo, a partir de la iteración 21 y hasta la 49, el residuo disminuyó de forma progresiva, pasando de 1.2 a  $10^{-9} \text{ m}^3/\text{día}$ , indicando una correcta conservación de masa y ausencia de acumulación neta de agua en el sistema.

El resultado final de esta simulación base estableció una capa freática equilibrada en 2299.5 metros, con un balance hídrico global cercano a cero, lo cual valida la coherencia del modelo conceptual y numérico en ausencia de perturbaciones antrópicas. El campo de velocidades del flujo subterráneo mostró un comportamiento dominado por gradientes horizontales, como es característico en sistemas de salares con estratigrafía plana y contrastes en densidad. Las componentes de velocidad en dirección  $y$  (norte-sur) fueron prácticamente nulas, mientras que en los ejes  $x$  (longitudinal) y  $z$  (vertical) se registraron velocidades que oscilaban entre  $10^{-4} \text{ m/s}$  en zonas de alta permeabilidad superficial, y hasta  $10^{-7} \text{ m/s}$  en formaciones profundas de baja conductividad.

Estos resultados permiten definir un marco de referencia fisicoquímico y numérico confiable sobre el cual se superponen, en secciones posteriores, los escenarios de extracción y reinyección. La estabilidad del régimen base y la respuesta hidrodinámica observada reafirman la solidez del modelo para representar el comportamiento del sistema Tilopozo en condiciones naturales.

## **4.2. Caso base con transporte de solutos**

Sobre el escenario base previamente descrito, se incorporó el transporte de solutos en régimen estacionario, con el objetivo de evaluar el comportamiento geoquímico del sistema bajo condiciones naturales. Esta simulación incluye únicamente los procesos de disolución y precipitación de fases minerales relevantes, excluyendo reacciones de intercambio iónico o adsorción superficial, los cuales serán tratados en etapas posteriores del estudio. La configuración química se desarrolló conforme a lo especificado en el apartado

de *Condiciones iniciales y módulo geoquímico*, utilizando la base de datos termodinámica de PHREEQC adaptada a PHAST.

Los resultados obtenidos reflejan un comportamiento coherente con lo reportado por Vásquez et al. (2013) [17], mostrando una distribución espacial de especies dominada tanto por el régimen de flujo como por la ubicación estratigráfica. En particular, el comportamiento del litio (especie trazadora clave en este estudio) evidencia una gradiente de concentración creciente desde los aluviales hacia el núcleo salino, lo cual concuerda con los patrones naturales de acumulación de solutos en ambientes terminales y con la presencia de frentes de mezcla activos.

Durante las iteraciones del modelo, se observa una ligera dilución en el borde entre la zona de mezcla y el núcleo, producto de la entrada difusa de aguas de menor salinidad provenientes del margen (*Figura 4.2*). Esta dilución es impulsada por el gradiente hidráulico impuesto y por las diferencias de concentración entre las unidades hidrogeológicas. Cabe destacar que esta transición química se acentúa en los primeros metros del perfil vertical, donde la conductividad hidráulica es relativamente mayor, facilitando así el ingreso y mezcla de fluidos con diferentes características iónicas.

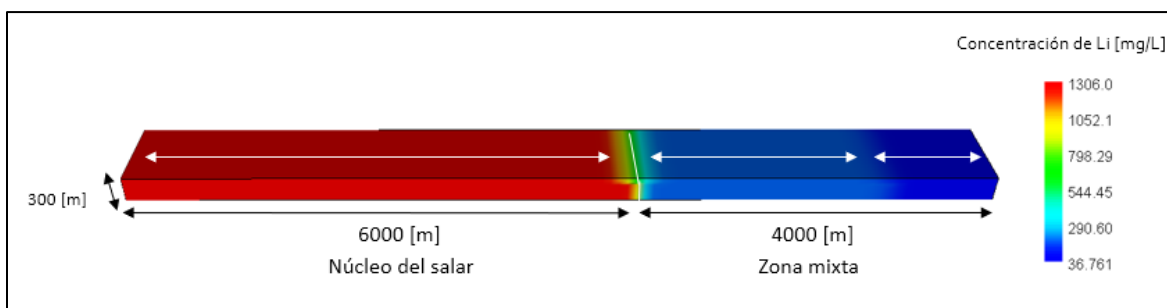


**Figura 4.2:** Concentración de litio en mg/L i. Al inicio de la simulación ii. Al final del último paso de tiempo.

La distribución del litio permanece estable en el núcleo profundo, debido a la baja movilidad asociada a las menores velocidades de flujo y a la elevada concentración inicial que limita los gradientes de difusión. En contraste, en la zona de contacto con los aluviales y depósitos más permeables, se evidencia un transporte activo del ion  $\text{Li}^+$ , influenciado por las condiciones de porosidad efectiva, dispersividad y tortuosidad del medio.

En términos geoquímicos, la evolución del sistema estuvo acompañada por ajustes en el índice de saturación (SI) de minerales como halita, dolomita y calcita, que reflejan las condiciones locales de sobresaturación o sub-

saturación inducidas por la mezcla y redistribución de solutos. No obstante, al tratarse de un régimen estacionario sin perturbaciones externas, los cambios en saturación mineral fueron localizados y de bajo impacto sobre la porosidad del sistema.

En conjunto, esta etapa del modelo valida la capacidad del sistema para mantener un equilibrio geoquímico estable bajo condiciones naturales, donde los gradientes hidráulicos y geoquímicos permiten una lenta evolución en el perfil de concentración.

### **4.3. Simulaciones en régimen transiente**

A partir de los resultados obtenidos en las simulaciones en régimen estacionario (tanto hidráulicas como geoquímicas) se establecieron las condiciones iniciales necesarias para abordar el análisis en régimen transiente, incorporando la evolución del sistema en el tiempo ante escenarios de intervención, como la reinyección de salmueras. El período de simulación cubre un total de 5 años.

La selección del paso de tiempo en modelos transientes está condicionada por consideraciones de estabilidad numérica, especialmente en simulaciones de transporte de solutos advección-dominante, como es habitual en sistemas salinos de baja recarga natural. Para asegurar dicha estabilidad, se recurrió al cálculo del número de Courant, también conocido como la condición CFL (Courant–Friedrichs–Lewy), el cual representa la relación entre la distancia que recorre el frente de flujo durante un paso de tiempo y la longitud característica de la malla espacial.

De la discretización espacial se sabe que el tamaño de celda en  $x$  e  $y$  es de 100 metros y para  $z$ , el cual no es uniforme, el mínimo valor es de 10 metros. Del campo de velocidades obtenido en las simulaciones del caso base en estado estacionario, se tiene el conocimiento que la mayor velocidad intersticial se da en las zonas de halita superior, debido a la mayor conductividad hidráulica y porosidad, con velocidades del orden de  $10^{-4}$  m/s. Para el desarrollo del modelo transiente, se estableció un paso de tiempo constante de 5 días (equivalente a 432 000 segundos). Sustituyendo estos valores en la ecuación (2.9), se obtiene un número de Courant de 0.432. Este valor se encuentra dentro del rango aceptable para estabilidad numérica en modelos de transporte de solutos ( $CFL \leq 1$ ), y más aún, se aproxima al intervalo óptimo

de operación recomendado en la literatura especializada (entre 0.1 y 0.5) para evitar oscilaciones numéricas y dispersión artificial [47].

Cabe señalar que se optó por una formulación totalmente implícita para la resolución de las ecuaciones de flujo y transporte, lo cual permite manejar pasos de tiempo relativamente cortos sin comprometer la estabilidad del sistema, siempre que el número de Courant se mantenga en rangos adecuados.

La elección de estas condiciones iniciales y de discretización garantiza que el modelo pueda capturar adecuadamente los procesos de acumulación y desplazamiento de solutos en el tiempo, sin introducir errores numéricos significativos.

#### 4.3.1. Simulaciones con extracción minera

Antes de incorporar pozos de reinyección en el modelo, resulta fundamental establecer el comportamiento del sistema bajo condiciones de solo extracción en el núcleo del salar. Esto permite evaluar la respuesta del modelo ante las operaciones mineras conceptuales y validar su estabilidad numérica y coherencia hidrogeológica. Dicha conducta es la esperada según lo mostrado por los pozos de observación de las compañías en el sector y los estudios hidrodinámicos desarrollados hasta el momento de la realización de esta memoria (*Figura 4.3*). La extracción constante de salmuera en el núcleo induce un descenso en los niveles, pasando de 2298.4 metros, según la condición de Dirichlet impuesta, a 2298.2 metros. Este descenso de la capa freática alcanza todo el sector del núcleo.

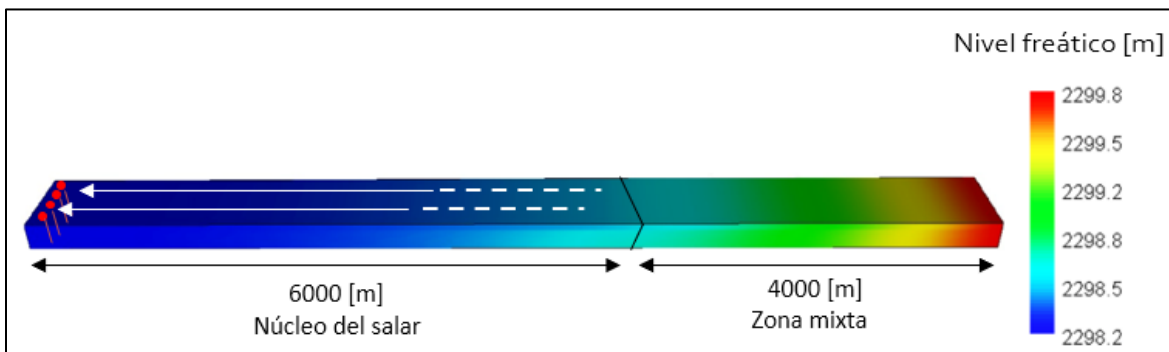


**Figura 4.3:** Nivel freático del modelo numérico para la simulación en régimen transiente y con actividad de extracción de salmuera en el núcleo.

A medida que se aproxima a la zona de mezcla, el nivel aumenta, hasta llegar a su máximo valor de 2299.8 metros, confirmando el comportamiento de barrera salina para la interfaz. De esta manera, la única zona que se vería afectada por la disminución de la napa sería el núcleo del salar debido a su comportamiento aislado mencionado en secciones anteriores.

En términos del balance hídrico, resumido en la *Tabla 4.1*, al final del paso de tiempo 345, se observa que los flujos de salida superan a los de entrada, con un residual ( $|entradas - salidas|$ ) del orden de  $10^{-4}$  (kg/año) y un error en el cálculo despreciable. Esta condición refleja el desequilibrio actual del sistema hidrogeológico del Salar de Atacama, evidenciando una tendencia progresiva hacia el vaciamiento de la cuenca.

**Tabla 4.1:** Balance hídrico de la simulación en régimen transiente con extracción de salmuera.

|                        | c                                  |
|------------------------|------------------------------------|
| Entrada de flujo       | $7.845358 \times 10^8$ (kg/año)    |
| Salida de flujo        | $9.540579 \times 10^8$ (kg/año)    |
| Desequilibrio residual | $1.219653 \times 10^{-4}$ (kg/año) |
| Error                  | 0.5%                               |

### 4.3.2. Simulaciones con reinyección sin transporte de solutos

Se incorpora finalmente la reinyección de salmuera cercano a la zona de mezcla, a 200 metros de esta, a una profundidad de 130 metros bajo la superficie. En una primera instancia se añaden los cuatro pozos al modelo distribuidos simétricamente, pero sin activar aún el transporte de solutos al sistema de salmueras con el propósito de evaluar el comportamiento hidráulico en estado transitorio. Este enfoque permite analizar los efectos de la reinyección sobre el balance hídrico y el nivel freático, asegurando además la estabilidad y convergencia numérica del modelo antes de considerar los procesos de transporte reactivo.

El caudal de reinyección por pozo se incrementó de manera gradual desde 1 L/s hasta alcanzar 15 L/s, permitiendo evaluar la respuesta del sistema ante distintos escenarios de recarga forzada. En todos los casos, la presencia de la reinyección genera una elevación progresiva del nivel freático, alcanzando

hasta 2298.3 metros, y en algunos casos incluso igualando la cota impuesta en el borde izquierdo (2298.4 m), tal como se expone en la *Figura 4.4*. Este resultado indica que la zona adyacente a los pozos de reinyección se convierte en el nuevo foco de máximo potencial hidráulico, desplazando el gradiente hacia el núcleo salino.

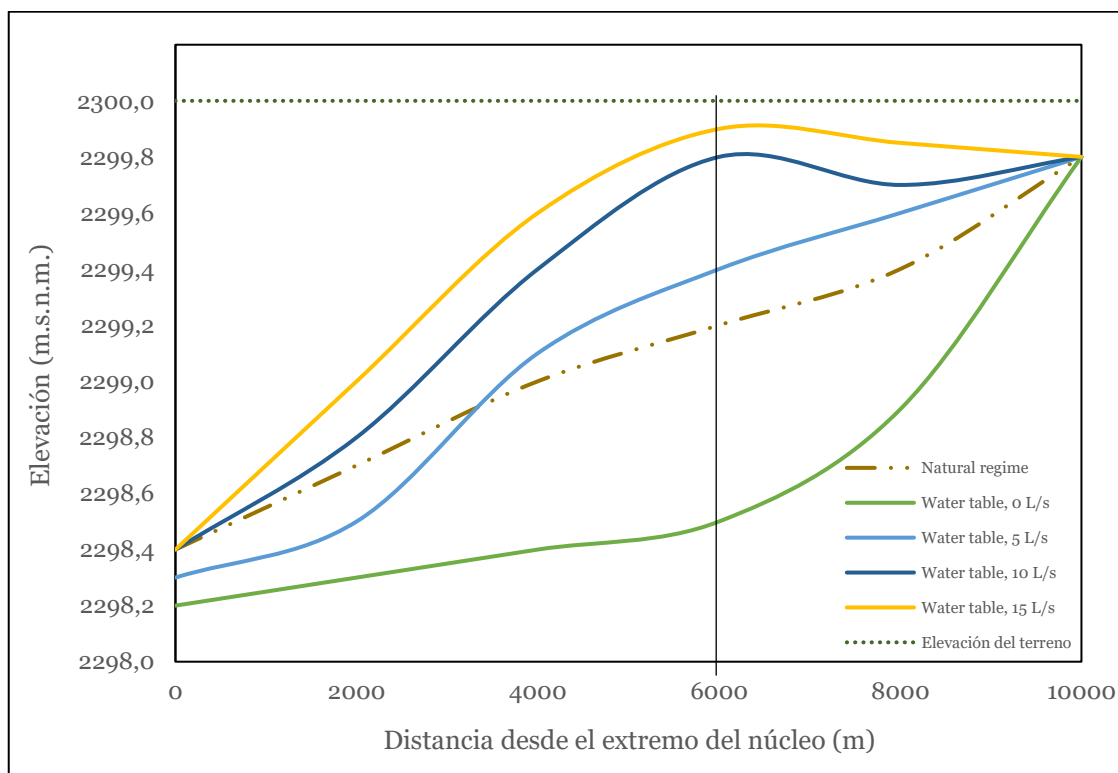


**Figura 4.4:** Sección transversal de la elevación del nivel freático para diferentes tasas de reinyección. La línea vertical representa el límite entre el núcleo y la interfaz salina.

A medida que se incrementan los caudales unitarios de reinyección, en el rango de 1 a 5 L/s, se observa una convergencia progresiva entre el comportamiento del modelo con actividad antropogénica y el caso base del sistema natural sin intervención humana (véase *Figura 4.1* en comparación con la *Figura 4.5*). Esta aproximación en las respuestas hidrodinámicas valida el efecto compensatorio de la reinyección sobre las perturbaciones inducidas por la extracción de salmueras, evidenciando su potencial como herramienta de gestión para mitigar el descenso del nivel freático.

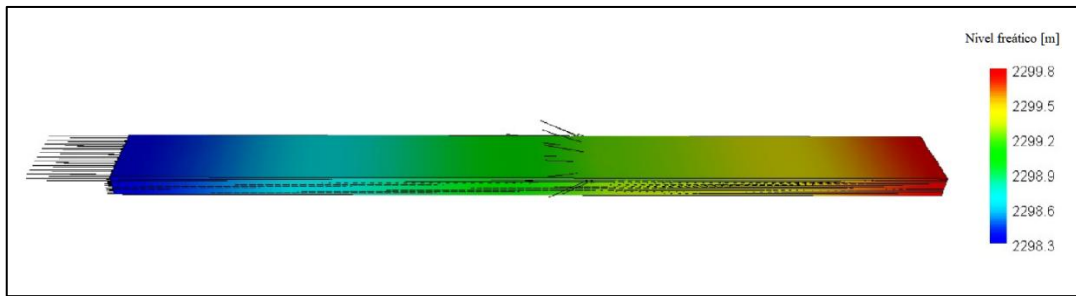


**Figura 4.5:** Simulación con reinyección de salmuera a un caudal de 5 L/s por pozo. Las líneas negras exageradas muestran las direcciones de los flujos.

La incorporación de caudales de reinyección del orden de 10 a 15 L/s produce un aumento significativo en el nivel piezométrico en los sectores aledaños a los puntos de ingreso, acercándose incluso a la elevación de la superficie. Este incremento hidráulico es directamente proporcional al caudal inyectado y puede generar la expansión lateral del gradiente hacia el núcleo del salar. En particular, a partir de los 15 L/s se observan cambios notorios en la dirección del flujo subterráneo (**¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.**), lo que sugiere una posible reversión localizada del gradiente hidráulico en los bordes del núcleo.

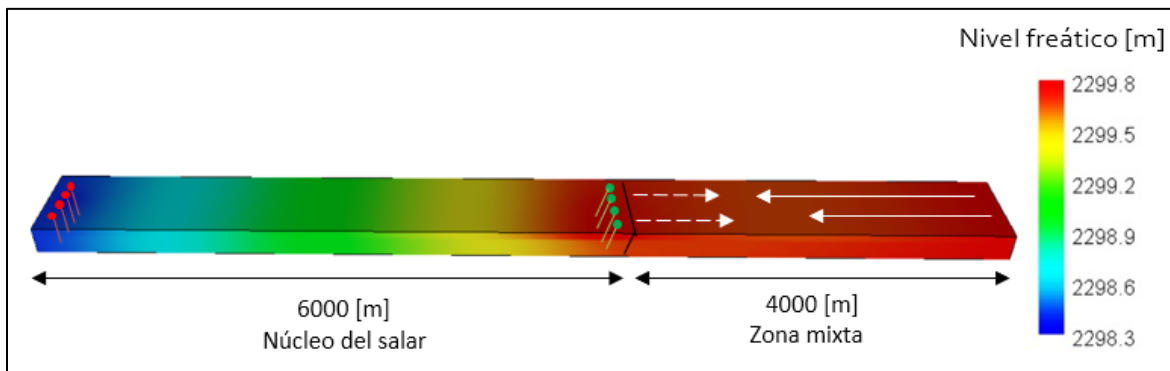


**Figura 4.6:** Simulación con reinyección de salmuera a un caudal de 15 L/s por pozo.

La *Tabla 4.2* resume el balance hídrico del escenario con 15 L/s de caudal unitario de reinyección, mostrando una coincidencia precisa entre los volúmenes de ingreso y egreso del sistema, lo que valida la conservación de masa y la consistencia del modelo numérico en ausencia de transporte de solutos. Esta configuración representa una base sólida para incorporar posteriormente los mecanismos de transporte advectivo y difusivo, y evaluar sus implicancias sobre la evolución geoquímica del sistema.

Un caso especial ocurre cuando se eleva aún más los caudales unitarios de ingresos, hasta un valor de 17 L/s. Bajo este escenario, el nivel freático sobrepasa el borde superior del modelo impuesto en 2300 metros en

respuesta a la elevación promedio del sector (*Figura 4.7*). Esto quiere decir que existe un caudal de reinyección que sobrepasaría las entradas del sistema, haciendo inviable su puesta en marcha bajo tales condiciones, aun cuando se trata el acuífero como no confinado.

**Tabla 4.2:** Balance hídrico del sistema de reinyección a un caudal unitario de 15 L/s.

|                        |                                    |
|------------------------|------------------------------------|
| Entrada de flujo       | 1.002866×10 <sup>9</sup> (kg/año)  |
| Salida de flujo        | 1.002866×10 <sup>9</sup> (kg/año)  |
| Desequilibrio residual | 8.967860×10 <sup>-5</sup> (kg/año) |
| Error                  | 1.1%                               |

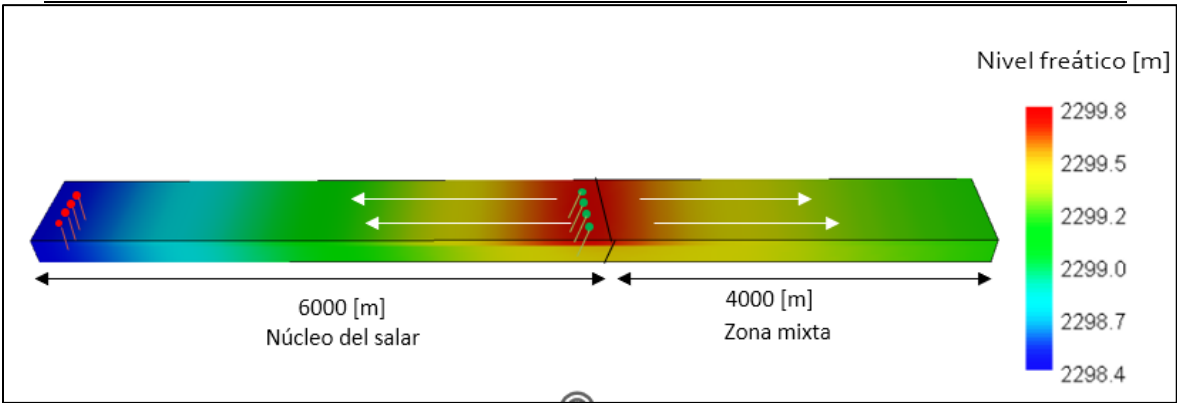


**Figura 4.7:** Nivel freático del sistema a un caudal de ingreso de 17 L/s por pozo.

### 4.3.3. Simulación de reinyección con transporte de solutos

Una vez alcanzada la estabilidad numérica del sistema en condiciones puramente hidráulicas, se procedió a incorporar el transporte de solutos a las simulaciones, con el fin de evaluar la evolución geoquímica asociada a la reinyección de salmueras en la proximidad del núcleo salino. A diferencia del caso realizado en régimen estacionario, se involucran ahora las reacciones de intercambio iónico y adsorción específica de litio, estimando la concentración del elemento de interés cercano a los pozos.

En los resultados preliminares, se observa que, a bajas tasas de reinyección ( $\leq 5$  L/s), el transporte de solutos permanece principalmente confinado a la zona de influencia directa de los pozos, con una dilución notoria debido a la diferencia de concentración de litio entre el acuífero receptor y la solución inyectada (*Figura 4.8*). Sin embargo, a medida que se incrementa el caudal,

los frentes salinos comienzan a migrar lateralmente e incluso penetran más hacia el núcleo halítico, generando un aumento local en la concentración de especies conservativas. Esto evidencia una posible retroalimentación geoquímica, que podría modificar los gradientes de concentración preexistentes, y, en consecuencia, alterar los mecanismos de difusión dominante.

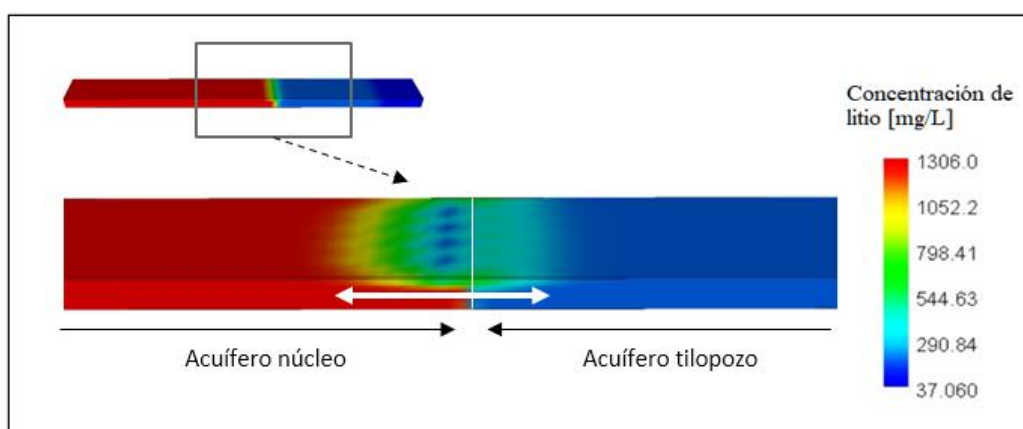


**Figura 4.8:** Concentración de litio en mg/L en el acuífero bajo reinyección. Caso de 5 L/s.

En escenarios con reinyección máxima (15 L/s), se detecta una inversión localizada en el flujo de solutos, con una propagación advectiva de salmuera reinyectada hacia zonas que, en condiciones naturales, se mantenían relativamente estables o sujetas a procesos de difusión lenta (*Figura 4.9*). Este cambio en la dinámica del sistema tiene implicancias importantes para la evolución del núcleo salino, ya que puede favorecer procesos de disolución secundaria, redistribución de especies iónicas y modificación de la porosidad efectiva en zonas de mezcla prolongada.

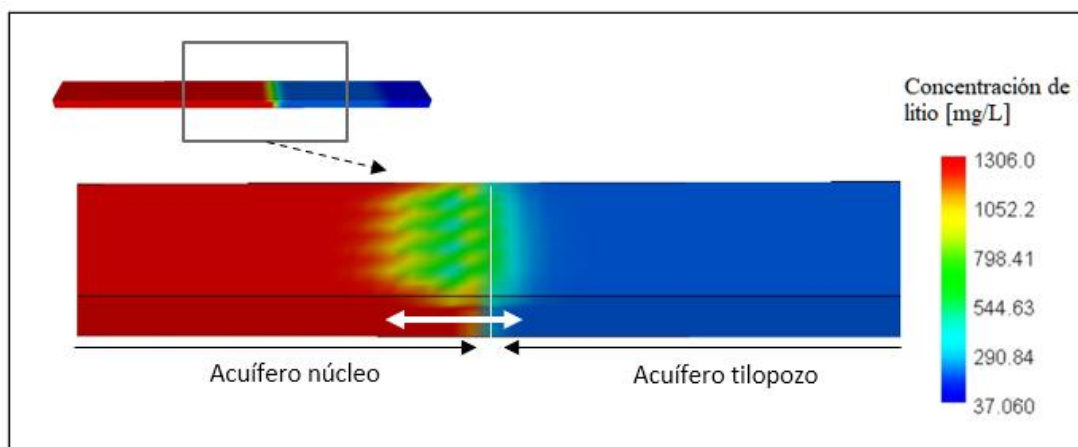


**Figura 4.9:** Concentración de litio en mg/L en el acuífero bajo reinyección. Caso de 15 L/s.

Un caso particular ocurre con los índices de saturación (SI) de los distintos minerales presentes en el *input* inicial de PHREEQC. Tal como está expuesto en la Sección 2, si el índice de saturación es cercano a cero, el acuífero entra en equilibrio con el mineral, sin alcanzar aún la precipitación; si es mayor a cero, el acuífero alcanza la sobresaturación, induciendo a la precipitación. La inclusión del transporte de solutos en el modelo permitió evaluar la evolución del índice de saturación de la halita ( $\text{NaCl}$ ) y dolomita ( $\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$ ), los cuales presentan un comportamiento sensible a las condiciones locales de concentración, temperatura y composición iónica. El zonamiento mineral que se observa a través de Model Viewer es idéntico al modelado por Vásquez et al. (2013) [17] mostrando las claras diferencias de concentración entre las zonas marginales, de mezcla y el núcleo (véase Figura 2.4). Los resultados químicos muestran que, en las cercanías de los pozos de reinyección, el SI de ambos minerales experimenta un incremento progresivo a medida que se intensifica la entrada de salmuera, alcanzando valores próximos a la saturación e incluso condiciones de sobresaturación en algunos nodos del modelo (Figura 4.10 y Figura 4.11).

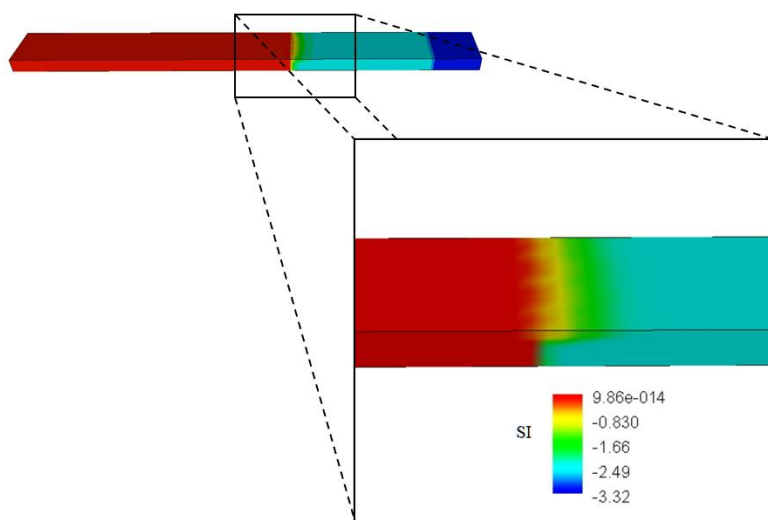


**Figura 4.10:** Índice de saturación de la halita. Caso de 10 L/s.

En el caso de la halita, la sobresaturación observada se explica por el incremento en las concentraciones locales de  $\text{Na}^+$  y  $\text{Cl}^-$ , producto del ingreso de salmueras concentradas y la reducción del flujo de salida por evaporación en superficie en la parte del núcleo (Figura 4.10). Este aumento en la actividad iónica genera un ambiente favorable para la precipitación secundaria de halita, especialmente en sectores con baja movilidad

hidráulica, donde la permanencia del fluido favorece el establecimiento del equilibrio químico. Esta precipitación localizada podría, a largo plazo, afectar la porosidad efectiva al ocupar los espacios intersticiales del subsuelo y modificar la conductividad hidráulica del medio poroso.

En cuanto a la dolomita, su comportamiento es más complejo debido a su dependencia de múltiples variables geoquímicas, como el pH, la relación  $\text{Ca}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$ , y la presión parcial de  $\text{CO}_2$ . No obstante, los resultados indican que el entorno cercano a los pozos presenta condiciones que favorecen la tendencia hacia el equilibrio de la dolomita, con aumentos en su SI correlacionados con zonas de mezcla entre salmuera reinyectada y agua de menor concentración (*Figura 4.11*). Este comportamiento sugiere una posible precipitación incipiente, especialmente en bordes de interfase entre distintas facies geoquímicas, lo cual podría actuar como un mecanismo de buffer geoquímico frente a la movilidad de ciertos elementos, como el  $\text{Mg}^{2+}$  o el carbonato.

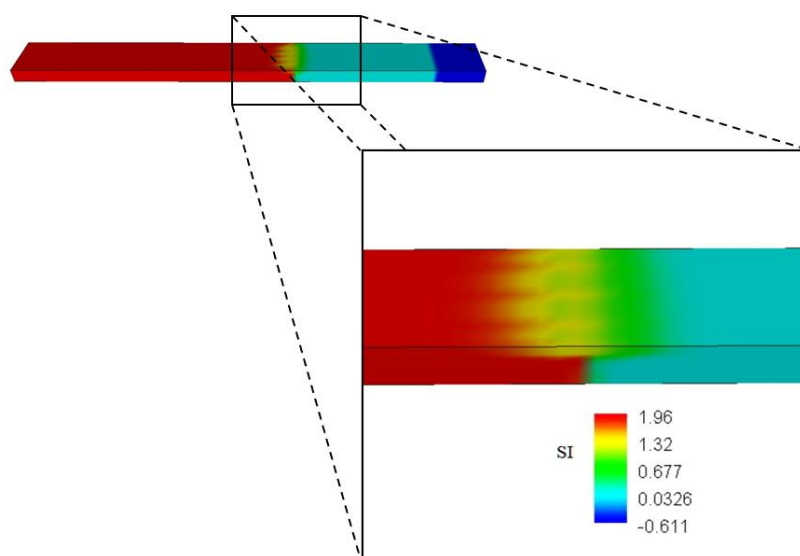


**Figura 4.11:** Índice de saturación de la dolomita. Caso de 10 L/s.

El comportamiento de ambos índices de saturación refuerza la necesidad de considerar la evolución geoquímica como un proceso dinámico, estrechamente acoplado al flujo subterráneo. En este contexto, la reinyección de salmuera no solo modifica las condiciones hidráulicas locales, sino que también puede inducir reacciones de precipitación o disolución mineral que afectan directamente la porosidad efectiva del medio.

Por ejemplo, la sobresaturación con respecto a minerales evaporíticos como la halita o la calcita puede provocar procesos de precipitación en zonas adyacentes al frente de reinyección, haciendo que estos elementos vayan ocupando los espacios intersticiales en el acuífero, reduciendo la porosidad y, por ende, la permeabilidad. Esta disminución puede generar cambios en la distribución del gradiente hidráulico, afectando la dirección y magnitud del flujo. Inversamente, la disolución de fases minerales en zonas subsaturadas puede aumentar la porosidad, generando zonas de mayor transmisividad que alteran los patrones de transporte de solutos.

Estos procesos de retroalimentación fisicoquímica, al operar en escalas de tiempo relevantes para la gestión del recurso, resaltan la importancia de integrar modelos geoquímicos acoplados en la simulación de escenarios de reinyección, a fin de anticipar impactos en la estructura porosa del sistema y en la eficiencia del almacenamiento subterráneo.

## 5. Conclusiones

El presente estudio permitió evaluar la viabilidad hidrogeológica y ambiental de la reinyección controlada de salmueras residuales, provenientes de procesos de extracción directa de litio, en el sistema Tilopozo del Salar de Atacama. Mediante la integración de información hidrogeológica, geoquímica y climática, así como la implementación de simulaciones numéricas de flujo subterráneo y transporte de solutos, se logró una representación detallada de los procesos asociados a la reinyección en un entorno salino altamente sensible.

Se compiló y analizó información bibliográfica y técnica existente que permitió describir las condiciones hidrogeológicas dominantes del salar y, particularmente, del sector Tilopozo. Se identificaron las principales unidades estratigráficas, los patrones de flujo regional y los gradientes de concentración que configuran la dinámica natural del sistema. Asimismo, se reconoció la relevancia de los bordes de halita y la zona de mezcla como regiones claves en el control geoquímico del sistema.

Se diseñó e implementó con éxito un modelo numérico tridimensional acoplado, que integra flujo de agua subterránea y transporte de solutos en condiciones estacionarias y transitorias. El modelo permitió simular escenarios de reinyección controlada de salmueras en el borde de la halita intermedia, evaluando tanto el comportamiento hidráulico como la evolución química del sistema receptor, con especial énfasis en la zona de mezcla.

Las simulaciones numéricas realizadas en este estudio evidencian que la reinyección de salmueras residuales genera un aumento significativo en el nivel freático en las inmediaciones de los pozos de inyección, con elevaciones desde aproximadamente 2298.4 m hasta valores cercanos a 2300 m. Este ascenso altera el gradiente hidráulico natural del sistema e incluso produce inversiones de flujo localizadas cuando se simulan tasas unitarias de reinyección del orden de 15 L/s. En términos geoquímicos, las simulaciones con caudales menores a 5 L/s muestran un efecto de dilución del litio, atribuible a la diferencia de concentración entre la salmuera reinyectada y el acuífero receptor, reduciendo su contenido desde cerca de 800 mg/L hasta valores del orden de 40 mg/L.

Por el contrario, al incrementar las tasas de reinyección entre 10 y 15 L/s, se observa un aumento localizado tanto en la concentración de solutos como en los índices de saturación de minerales como halita y dolomita, lo que indica condiciones de sobresaturación y favorece procesos de precipitación mineral. En estos escenarios, la concentración de litio puede incrementarse desde 40 mg/L hasta cerca de 1000 mg/L en el entorno inmediato de los pozos, acotando su área de influencia con respecto a caudales de ingreso menores. Asimismo, los índices de saturación reflejan un cambio significativo: la halita aumenta de un valor inicial de  $-2.49$  hasta  $-0.830$ , acercándose al equilibrio; y la dolomita pasa de un valor cercano al equilibrio ( $SI \approx 0.0326$ ) a un estado de sobresaturación marcado ( $SI \approx 1.32$ ).

Este proceso de precipitación inducida tiene implicancias directas sobre las propiedades físicas del medio poroso, particularmente la porosidad y la permeabilidad. A medida que se forman fases minerales sólidas dentro de los poros, estos pueden ocluirse parcial o totalmente, disminuyendo la porosidad efectiva y modificando la conectividad del flujo. Esto introduce retroalimentaciones fisicoquímicas que deben considerarse en escenarios de operación prolongada, ya que podrían afectar la eficiencia hidráulica del sistema y limitar la capacidad de reinyección a largo plazo.

En conjunto, los resultados obtenidos respaldan la reinyección como medida de gestión, siempre que se integre en un marco de monitoreo, modelación y control adaptativo. Su implementación debe considerar cuidadosamente la ubicación de los pozos, las tasas de recarga, la composición de la salmuera inyectada y los tiempos de residencia, con el fin de evitar efectos adversos como la movilización de frentes salinos o la sobresaturación de minerales. La modelación demostró ser una herramienta fundamental para predecir dichos impactos y ajustar las condiciones de operación de manera segura y sostenible. Se recomienda profundizar en futuras investigaciones la modelación cinética de reacciones minerales, el análisis de sensibilidad de parámetros geoquímicos y la validación del modelo mediante datos de campo provenientes de pruebas piloto controladas.

## **5.1. Trabajos futuros**

A partir de los resultados obtenidos en este estudio, se proponen las siguientes recomendaciones y líneas de trabajo futuro, con el objetivo de

fortalecer el análisis de la reinyección de salmueras como medida de gestión sustentable en el Salar de Atacama:

- La presente modelación se basó en condiciones de equilibrio instantáneo para evaluar la saturación mineral. Sin embargo, para una representación más precisa de los procesos geoquímicos a largo plazo, se sugiere incorporar mecanismos de disolución y precipitación cinética, especialmente para minerales clave como dolomita, halita, yeso y calcita. Esto se puede lograr mediante las funciones *KINETICS* y *RATES* en PHREEQC.
- Se recomienda realizar análisis de sensibilidad de parámetros críticos como porosidad, evaporación y tamaño de celda, así como la calibración del modelo mediante series de datos observados, con el fin de reducir la incertidumbre asociada a la predicción de impactos geoquímicos.
- Otro componente clave son los valores de conductividad hidráulica, los cuales varían significativamente in situ, pero, en este caso, se asumió un material homogéneo. De esta manera, integrando una mayor cantidad de datos de campo y mediciones, se lograrían alcanzar resultados más precisos.
- Se recomienda ampliar los escenarios de simulación incluyendo variaciones en la calidad de la salmuera reinyectada, tales como salmueras parcialmente tratadas, diluidas o mezcladas con agua dulce residual, para evaluar su efecto sobre el equilibrio geoquímico y la posible minimización de procesos de sobresaturación.
- De igual forma, se puede ampliar los escenarios considerando distinta ubicación y profundidad de los pozos, acompañado de un estudio hidrogeológico que sustente dicha ubicación.
- Dado que el balance hídrico de los salares está estrechamente influenciado por la evaporación, se propone integrar escenarios climáticos futuros que permitan anticipar variaciones en las tasas de evaporación y su efecto sobre el sistema acuífero, especialmente bajo contextos de aridez creciente o cambio climático regional.
- Debido a los esfuerzos computacionales, el horizonte de simulación en este caso se fijó solo en 5 años. Se sugiere ampliar los años de simulación para evaluar los efectos de reinyección a largo plazo, considerando que los cambios más notorios en el sistema se dan en plazos de décadas.

# Referencias

- [1] Kavanagh, L., Keohane, J., García Cabellos, G., Lloyd, A., & Cleary, J. (2018). Global lithium sources—Industrial use and future in the electric vehicle industry: A review. *Resources*. 7(3), 57.
- [2] Comisión Chilena del Cobre [COCHILCO]. (2024). Informe mercado del litio: Proyección 2024–2025.
- [3] U.S. Geological Survey. (2025). Mineral commodity summaries 2025.
- [4] Warren, J.K. (2010). Evaporites through time: tectonic, climatic and eustatic controls in marine and nonmarine deposits. *Earth-Science Reviews*. 98, 217–268.
- [5] Warren, J.K., (2016). Evaporites. A geological compendium, Evaporites. Springer.
- [6] Choubey, P. K., Kim, M.-S., Srivastava, R. R., Lee, J.-C., & Lee, J.-Y. (2016). Advance review on the exploitation of the prominent energy-storage element: Lithium. Part I: From mineral and brine resources. *Minerals Engineering*, 89, 119–137.
- [7] Ministerio de Hacienda [Gobierno de Chile]. (2022). Estrategia Nacional del Litio.
- [8] Flexer, V., Baspineiro, C. F., & Galli, C. I. (2018). Lithium recovery from brines: A vital raw material for green energies with a potential environmental impact in its mining and processing. *Science of the Total Environment*, 639, 1188–1204.
- [9] Farahbakhsh, J., Arshadi, F., Mofidi, Z., Mohseni-Dargah, M., Kök, C., Assefi, M., Soozanipour, A., Zargar, M., Asadnia, M., Boroumand, Y., Presser, V., & Razmjou, A. (2024). Direct lithium extraction: A new paradigm for lithium production and resource utilization. *Desalination*, 575, 117249.
- [10] Zourek, L., (2020). Modelling scenarios for re-injection of spent brine from Direct Lithium Extraction. ETH Zurich Institute of Biogeochemistry and Pollutant Dynamics. Master Thesis, July 2020.
- [11] Amphos 21. (2018b). Modelo Hidrogeológico Consolidado Cuenca del Salar de Atacama. Santiago: Para Comité Minería no Metálica CORFO. Estudio de Modelos Hidrogeológicos Conceptuales Integrados para los Salares de Atacama, Maricunga y Pedernales.

- [12] Duffy, C. J., & Al-Hassan, S. (1988). Groundwater circulation in a closed desert basin: Topographic scaling and climatic forcing. *Water Resources Research*, 24(9), 1675–1688.
- [13] Munk, L., Hynek, S., Bradley, D.C., Boutt, D., Labay, K.A., Jochens, H. (2016). *Lithium Brines: A Global Perspective* (Chapter 14).
- [14] Houston, J., Butcher, A., Ehren, P., Evans, K., Godfrey, L. (2011). The evaluation of brine prospects and the requirement for modifications to filing standards. *Econ. Geol.* 106, 1125–1239.
- [15] Risacher, F., Alonso, H., Salazar, C. (2003). The origin of brines and salts in Chilean salars: a hydrochemical review. *Earth-Science Reviews*. 63, 249–293.
- [16] Marazuela, M. A., Vázquez-Suñé, E., Ayora, C., García-Gil, A., & Palma, T. (2019a). Hydrodynamics of salt flat basins: The Salar de Atacama example. *Science of the Total Environment*, 651, 668–683.
- [17] Vázquez, C., Ortiz, C., Suárez, F., Muñoz, J.F. (2013). Modeling flow and reactive transport to explain mineral zoning in the Atacama salt flat aquifer, Chile. *J. Hydrol.* 490, 114–125.
- [18] Dirección General de Aguas [DGA]. (2013). *Análisis de la Oferta Hídrica del Salar de Atacama*. Santiago, Chile.
- [19] Marazuela, M.A., Vázquez-Suñé, E., Ayora, C., García-Gil, A. (2020). Towards more sustainable brine extraction in salt flats: learning from the Salar de Atacama. *Science of the Total Environment*. 703, 135605.
- [20] Houston, J. (2006). Evaporation in the Atacama Desert: An empirical study of spatio-temporal variations and their causes. *Journal of Hydrology*, 330(1–2), 402–412.
- [21] Werner, A. D., Bakker, M., Post, V. E. A., Vandenbohede, A., Lu, C., Ataie-Ashtiani, B., Simmons, C. T., & Barry, D. A. (2013). Seawater intrusion processes, investigation and management: Recent advances and future challenges. *Advances in Water Resources*, 51, 3–26.
- [22] Marazuela, M. A., Vázquez-Suñé, E., Custodio, E., Palma, T., García-Gil, A., & Ayora, C. (2018). 3D mapping, hydrodynamics and modelling of the freshwater–brine mixing zone in salt flats similar to the Salar de Atacama (Chile). *Journal of Hydrology*, 561, 223–235.
- [23] Gutiérrez Baeza, B. A. (2020). Estudio y comportamiento de la interfaz salina en medios porosos considerando densidad variable. Caso estudio: acuífero del Salar de Atacama, II Región de Antofagasta, Chile [Tesis de magíster, Universidad de Chile]. Universidad de Chile, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas.

- [24] Mardones, L. (1986). Características geológicas e hidrogeológicas del Salar de Atacama. In: Lagos, G. (Ed.), *El Litio, Un Nuevo Recurso Para Chile*, pp. 181–216.
- [25] Tejeda, I., Cienfuegos, R., Muñoz, J. F., & Durán, M. (2003). Numerical modeling of saline intrusion in Salar de Atacama. *Journal of Hydrologic Engineering*, 8(1), 25–34.
- [26] Muñoz-Pardo, J. F., Ortiz-Astete, C. A., Mardones-Pérez, L., & de Vidts-Sabelle, P. (2004). Funcionamiento hidrogeológico del acuífero del núcleo del salar de Atacama, Chile. *Ingeniería Hidráulica en México*, 19(3), 69–81.
- [27] Holzbecher, E. (2005). Groundwater flow pattern in the vicinity of a Salt Lake. *Hydrobiologia* 532, 233–242.
- [28] Hamann, E., Post, V., Kohfahl, C., Prommer, H., & Simmons, C. T. (2015). Numerical investigation of coupled density-driven flow and hydrogeochemical processes below playas. *Water Resources Research*, 51(11), 9338–9352.
- [29] Corenthal, L. G., Boutt, D. F., Hynek, S. A., & Munk, L. A. (2016). Regional groundwater flow and accumulation of a massive evaporite deposit at the margin of the Chilean Altiplano. *Geophysical Research Letters*, 43(15), 8017–8025.
- [30] Marazuela, M. A., Vázquez-Suñé, E., Ayora, C., García-Gil, A., & Palma, T. (2019b). The effect of brine pumping on the natural hydrodynamics of the Salar de Atacama: The damping capacity of salt flats. *Science of the Total Environment*, 654, 1118–1131.
- [31] SQM. (2021b). Informe N° 28 del Plan de Seguimiento Ambiental Hidrogeológico del Proyecto “Cambios y Mejoras de la Operación Minera en el Salar de Atacama”.
- [32] Vera, M. L., Torres, W. R., Galli, C. I., Chagnes, A., & Flexer, V. (2023). Environmental impact of direct lithium extraction from brines. *Nature Reviews Earth & Environment*, 4(3), 149–165.
- [33] SQM. (2021). Modelo Hidrogeológico Conceptual del Salar de Atacama. Estudio de Impacto Ambiental Proyecto Plan de Reducción de Extracciones en el Salar de Atacama. SQM S.A.
- [34] Nicolaci, H., Young, P., Snowdon, N., Rai, A., Chen, T., Zhang, J., Lin, Y., Bailey, E., Shi, R., Zheng, N. (2023). Direct Lithium Extraction: A potential game changing technology. Goldman Sachs.
- [35] Ezama, I., (2018). Direct Extraction Lithium Processes: The Challenges of Spent Brine Disposal.

- [36] Zelandez & Summit Nanotech. (2024). White Paper: Best practice for recycling and reinjecting lithium brine.
- [37] SQM. (2024). Decimoséptimo informe de extracción anual de salmuera de las operaciones en el Salar de Atacama: Periodo 13 agosto 2023 – 12 agosto 2024. Sociedad Química y Minera de Chile S.A.
- [38] Grant, A., Morgan, G. (2019). Re-Injection Enhanced Production for Direct Lithium Extraction (DLE) Projects: The risks and opportunities of spent brine re-injection. Jade Cove Partners & Zelandez.
- [39] Gutiérrez, G., & Ruiz-León, D. (2024). Lithium in Chile: Present status and future outlook. *Materials Advances*, 5(20), 7850-7861.
- [40] Walter, S. (2024). A preliminary assessment of DLE Reinjection: Maricunga and Atacama analogues.
- [41] Charlton, S. R., Kipp, K. L., & Parkhurst, D. L. (2011). PHAST version 2—A program for simulating groundwater flow, solute transport, and multicomponent geochemical reactions (Techniques and Methods 6–A35). U.S. Geological Survey.
- [42] Beltrán, J. J., Marazuela, M. A., Baquedano, C., Martínez-León, J., & García-Gil, A. (2023). The genesis of an extremely acidic perched aquifer within roasted pyrite waste in a fully urbanized area (Zaragoza, Spain). *Science of The Total Environment*, 896, 165293.
- [43] Sørensen, A., Postma, D., Kazmierczak, J., & Jakobsen, R. (2018). Spatial variability of groundwater arsenic concentration as controlled by hydrogeology: Conceptual analysis using 2-D reactive transport modeling. *Water Resources Research*, 54(7), 4605–4624.
- [44] Marty, N. C. M., Hamm, V., Castillo, C., & Kervévan, C. (2020). Hydrogeochemical modelling of corrosion effects and barite scaling in deep geothermal wells of the North German Basin using PHREEQC and PHAST. *Geothermics*.
- [45] Hsieh, P.A., and Winston, R.B. (2002). User's guide to Model Viewer, a program for three-dimensional visualization of ground-water model results: U.S. Geological Survey Open-File Report 2002–106, 18 p.
- [46] Parkhurst, D. L., & Appelo, C. A. J. (2013). Description of input and examples for PHREEQC version 3: A computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations (Techniques and Methods 6–A43). U.S. Geological Survey.
- [47] Anderson, M. P., Woessner, W. W., & Hunt, R. J. (2015). *Applied groundwater modeling: Simulation of flow and advective transport* (2nd ed.). Academic Press.

- [48] SQM. (2021a). Modelo Conceptual Hidrogeológico del Sistema Tilopozo: Estudio de Impacto Ambiental, Proyecto Plan de Reducción de Extracciones en el Salar de Atacama (Anexo 5-6).
- [49] Bevacqua, P. (1988). Descripción de las unidades geológicas de superficie del Salar de Atacama. Santiago: MINSAL Ltda.
- [50] Arriagada, C. (2009). Estudio geológico-estructural de la cuenca del Salar de Atacama. Informe Inédito para SQM Salar S.A.
- [51] Valdivielso, S., Vázquez-Suñé, E., Herrera, C., & Custodio, E. (2021). Characterization of precipitation and recharge in the peripheral aquifer of the Salar de Atacama. *Science of the Total Environment*.
- [52] Philip, J. (1957). Evaporation and moisture and heat fields in the soil. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 14, 354-366.
- [53] Munk, L. A., Lee, J. E., Boutt, D. F., Moran, B. J., McKnight, S., & Jenckes, J. (2021). Hydrogeologic and geochemical distinctions in freshwater-brine systems of an Andean salar. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 22(6).
- [54] Gelhar, L. W., Welty, C., & Rehfeldt, K. R. (1992). A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 28(7), 1955–1974.
- [55] Fu, J., Thomas, H. R., & Li, C. (2021). Tortuosity of porous media: Image analysis and physical simulation. *Earth-Science Reviews*, 212, 103439.
- [56] Rockwood-Lithium, 2015. Estudio Hidrogeológico y Modelo Numérico Sector Sur del Salar de Atacama (Anexo 1). Para Estudio de Impacto Ambiental Proyecto Modificaciones y Mejoramiento del Sistema de Pozas de Evaporación solar en el Salar de Atacama. Santiago, Chile.
- [57] Boutt, D.F., Hynek, S.A., Munk, L.A., Corenthal, L.G. (2016). Rapid recharge of fresh water to the halite-hosted brine aquifer of Salar de Atacama, Chile. *Hydrol. Process.* 30, 4720–4740.
- [58] Ahumada, C. (2015). Caracterización hidrogeológica e hidroquímica del sector sur del Salar de Atacama, II región de Antofagasta, Chile [Tesis de magíster, Universidad de Málaga, Facultad de Geología].