

MÉTODOS DE LA ESTADÍSTICA BIVARIADA PARA LA AGRUPACIÓN HIDROQUÍMICA DE AGUAS NATURALES Y MINEROMEDICINALES DE LA SIERRA DEL ROSARIO

**Autores: MSc. Margaret Suárez Muñoz⁽¹⁾,
Dra. Patricia González Hernández⁽¹⁾,
Dr. Juan R. Fagundo Castillo⁽¹⁾,
Griselda Benítez⁽²⁾,
Lic. Clara Melián Rodríguez⁽¹⁾,
Bárbara Luna Saucedo⁽²⁾,
MSc. Maritza Llerena Portilla⁽³⁾**

Centros: ⁽¹⁾ Centro Nacional de Termalismo “Víctor Santamarina”.

⁽²⁾ Centro Nacional de Investigaciones Científicas

⁽³⁾ Instituto de Geografía Tropical.

E-mail: ⁽¹⁾ patricia@rsrch.isctn.edu.cu

⁽²⁾ luna@química.cneuro.edu.cu

⁽³⁾ maritza@igt.edu.cu

RESUMEN

Los métodos de estadística bivariada han sido ampliamente utilizados en la Hidroquímica y se basan en la estimación de una variable a partir de otra con la cual guarda una estrecha relación matemática. El empleo de estos métodos es muy útil en bases experimentales, donde se generan un gran número de datos hidroquímicos, hidrológicos e hidrogeológicos, ya que los mismos brindan una valiosa información acerca de las regularidades matemáticas entre las diferentes variables, facilitando la interpretación de los procesos geoquímicos que se producen.

En este trabajo, se utilizan dentro de los métodos de análisis bivariado, específicamente el análisis de regresión y la correlación lineal simple para estudiar las diferentes facies

hidroquímicas presentes en el sistema hidrotermal de San Diego de los Baños, teniendo en cuenta la relación existente entre la geología (tipo de rocas de la zona de estudio) y los posibles fenómenos de mezcla. Para ello se han tomado datos hidrogeoquímicos de muestras representativas correspondientes a un trabajo de exploración detallada llevado a cabo en el sector hidrogeológico San Diego de los Baños–Bermejales y a un muestreo realizado en el manantial Mil Cubres. Se tuvieron en cuenta para escoger los grupos significativos todas las variables (Temperatura, pH, TSS, CaCO_3 , CO_2 , H_2S , H_2SiO_3 , HCO_3^- , CO_3^{2-} , Cl^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+} , Mg^{2+} , $\text{Na}^+ + \text{K}^+$) y se escogieron para realizar los gráficos los datos de sulfato, calcio y sodio más potasio como representantes de iones que muestran importantes variaciones con los procesos de mezcla y que se encuentran afectados en menor medida por parámetros externos, de cada manantial o pozo tomando como base los estudios realizados con anterioridad de estadística multivariada.

Todo lo anterior permitió una agrupación de los diferentes tipos de aguas de la Sierra del Rosario, así como de diferentes patrones hidroquímicos característicos de esta zona de estudio, con el objetivo de reafirmar los resultados obtenidos con el uso de la estadística multivariada y de esta forma determinar las aguas que están estrechamente relacionadas entre sí y por ende, reafirmar o desechar hipótesis del origen común de su quimismo.

ABSTRACT

The bivariate statistical methods have been broadly used in Hydrochemistry and they are based on the estimation of a variable starting from another with which keeps a narrow mathematical relationship. The employment of these methods is very useful in experimental bases, where it is generated a great number of hydrochemical, hydrological and hydrogeological data, because they offer a valuable information about the mathematical regularities among the different variables, facilitating the interpretation of the geochemical processes taking place in waters.

In this work, the bivariate analysis methods were used, specifically the regression analysis and the simple lineal correlation, to study the different hydrochemical facies present in the hydrothermal system of San Diego de los Baños, related with the existent relationship among the geology (type of rocks) and the possible mixture phenomenon. The hydrogeochemical data

correspond to a detailed exploration work carried out in the hydrogeological sector of San Diego de los Baños–Bermejales and to a sampling carried out in the spring Mil Cumbres. All the variables (Temperature, pH, TSS, CaCO_3 , CO_2 , H_2S , H_2SiO_3 , HCO_3^- , CO_3^{2-} , Cl^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+} , Mg^{2+} , $\text{Na}^+\text{+K}^+$) were chosen to form the significant groups and the data of sulfate, calcium and sodium+potassium was chosen to carry out the graphics, because they are representatives ions that show important variations with the mixture processes and they are affected lower by external parameters. This entire work take as base the multivariate statistical studies carried out previously.

All this allowed a grouping of the different types of waters of the Rosario's Sierra, as well as of different hydrochemical patron characteristic of this area, with the objective of reaffirming the results obtained with the use of the multivariate statistica and in this way to determine the closely related waters and to reaffirm or to discard common origin hypothesis.

INTRODUCCIÓN

El Balneario San Diego de los Baños se encuentra ubicado junto al pueblo del mismo nombre, municipio Los Palacios, provincia de Pinar del Río (Cuba), en las coordenadas N 315 037 E 256 008 (Fig. 1). Comprende tres manantiales fundamentales: El Tigre, El Templado y La Gallina, los cuales brotan en el cauce del río San Diego de los Baños. A unos 7 Km aguas arriba alumbran, en el propio cauce, varios manantiales denominados M1, M2, M3, M4 y M5 (BM, Fig 1) (coordenadas N 318 351 E 250 468). Todas estas manifestaciones termales están asociadas a las fallas Pinar y San Diego de los Baños. La primera falla separa las zonas estructuro-faciales Guaniguanico y San Diego de los Baños, mientras que la segunda falla separa las dos subzonas en que se divide la unidad tectónica Guaniguanico (Sierra de los Organos y Sierra del Rosario).

Análisis de regresión y correlación lineal simple

Los métodos de estadística bivariada han sido ampliamente utilizados en la Hidroquímica y se basan en la estimación de una variable a partir de otra con la cual guarda una estrecha relación matemática. El empleo de estos métodos es muy útil en bases experimentales, donde se generan

un gran número de datos hidroquímicos, hidrológicos e hidrogeológicos (Guerón et. al., 1993; Fagundo et. al., 1992; Fagundo, 1996), ya que los mismos brindan una valiosa información acerca de las regularidades matemáticas entre las diferentes variables, facilitando la interpretación de los procesos geoquímicos que se producen (Morell et. al., 1997); así como la estimación de una variable en función de otra de más fácil medición para el monitoreo de la calidad hidroquímica de las aguas (Fagundo y Rodríguez, 1991; Fagundo, 1998).

Para la aplicación de los modelos de regresión y correlación lineal simple, es requisito a priori, que las variables utilizadas posean una distribución normal, aspecto éste que cumplen por lo general las variables hidroquímicas cuando existe un número grande de datos.

Los modelos de regresión lineal simple entre parejas de datos se expresan mediante una línea recta del tipo $y = ax + b$, donde a es la pendiente y b el intercepto. El ajuste de los datos se realiza mediante mínimos cuadrados. El coeficiente de determinación R^2 representa la variabilidad expresada por el modelo ($R=100\%$ equivale a un coeficiente de correlación $r = \pm 1$).

El empleo de los métodos de regresión y correlación lineal en este trabajo se realiza, con el objetivo de determinar las aguas que están estrechamente relacionadas entre sí y por ende, reafirman o desechan hipótesis de origen común de su quimismo. Para ello se tomará como base para la selección de los datos a ajustar en cada caso, los tipos de aguas, que se originan por los principales procesos geoquímicos de interacción agua-roca y de mezcla de aguas.

MATERIALES Y MÉTODOS

Se utilizan dentro de los métodos de análisis bivariado, específicamente el análisis de regresión y la correlación lineal simple para estudiar las diferentes facies hidroquímicas presentes en el sistema hidrotermal de San Diego de los Baños, teniendo en cuenta la relación existente entre la geología (tipo de rocas de la zona de estudio) y los posibles fenómenos de mezcla.

Del total de muestras correspondientes al trabajo de exploración detallada llevado a cabo en el sector hidrogeológico San Diego de los Baños–Bermejales (117 datos) y el muestreo realizado en

el manantial Mil Cumbres (19 datos) por Fagundo et. al. (1993), fueron seleccionados 22 datos representativos de los tipos de aguas presentes en esos sitios. Con los mismos fue creada una matriz constituida por 22 individuos y 14 variables (Temperatura, pH, TSS, CaCO_3 , CO_2 , H_2S , H_2SiO_3 , HCO_3^- , CO_3^{2-} , Cl^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+} , Mg^{2+} , $\text{Na}^+\text{+K}^+$). Estos datos fueron procesados mediante la hoja de cálculo Microsoft Excel de 1997. Se tuvieron en cuenta para escoger los grupos significativos todas las variables y se escogieron para realizar los gráficos los datos de sulfato, calcio y sodio más potasio como representantes de iones que muestran importantes variaciones con los procesos de mezcla y que se encuentran afectados en menor medida por parámetros externos, de cada manantial o pozo tomando como base los estudios realizados con anterioridad de estadística multivariada.

Las mediciones de los parámetros geoquímicos se realizaron “*in situ*” mediante pHmetro y medidor de temperatura y potencial redox (Eh) modelo HI-8424 de la marca HANNA. Los contenidos de CO_2 y H_2S , así como la alcalinidad total (HCO_3^- y CO_3^{2-}) fueron también determinados “*in situ*”, mientras que los restantes macroconstituyentes (Cl^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+} y Mg^{2+}) y componentes trazas se analizaron en el laboratorio antes de las 24 horas de tomadas las muestras. Las marchas analíticas se efectuaron mediante las técnicas analíticas estándar (APHA, AWWA, WPCF, 1992).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Teniendo en cuenta los resultados obtenidos por la aplicación de los métodos de análisis multivariado, desarrollado por P. González y colaboradores, en trabajos anteriores y que describen el agrupamiento de diferentes tipos de aguas de la Sierra del Rosario, así como de diferentes patrones hidroquímicos característicos de esta zona de estudio, se constituyen tres grupos fundamentales como miembros extremos y se verifica la presencia en ellos, según el análisis bivariado con un 95 % de confianza, de las diferentes aguas de la zona y su relación en la formación de aguas de mezcla.

Los grupos formados son los siguientes:

Grupo 1. Constituido por el P1 237-320 (aguas SO₄-Ca) y el manantial Mil Cumbres, los pozos P2 90m y P3 0-90m (aguas HCO₃-Ca), como miembros extremos de cada tipo de agua, los manantiales El Tigre, El Templado y La Gallina (San Diego de los Baños), los manantiales BM2, BM5 (Bermejales) y el pozo P1 0-122m (aguas de mezcla). Con el objetivo de verificar si realmente estas aguas son el resultado de la mezcla de diferentes porcentajes de los miembros extremos se realiza la correlación lineal Ca²⁺ vs SO₄²⁻ y Ca²⁺ vs Na⁺+K⁺. Los resultados se muestran en la tabla I.

Tabla I. Resultados de las correlaciones lineales entre los iones Ca²⁺ vs SO₄²⁻ y Ca²⁺ vs Na⁺+K⁺, para el Grupo 1.

Iones	Ecuación	Coefficiente de determinación (R ²)
Ca ²⁺ vs SO ₄ ²⁻	Y=1.4245*X-5.8756	R ² =0.9759
Ca ²⁺ vs Na ⁺ +K ⁺	Y=0.2346*X-0.3393	R ² =0.6489

En la tabla I se observa que la correlación Ca²⁺ vs SO₄²⁻ muestra un elevado coeficiente de determinación, indicativo de una buena correlación entre estos dos iones. Por otra parte para los iones Ca²⁺ vs Na⁺+K⁺ el coeficiente de determinación es bajo, mostrando una mala correlación entre estos dos iones, lo que se justifica teniendo en cuenta que estas aguas son fundamentalmente cálcicas y por tanto la relación con el sodio no es marcada.

En ambas líneas de regresión (Fig. 2 y 3) los datos se orientan según la secuencia HCO₃-Ca (Mil Cumbres, P2 90m y P3 0-90m) → SO₄ > HCO₃-Ca (El Tigre, El Templado) → SO₄-Ca (La Gallina, P1 0-122 m), lo que se refleja por un incremento de los iones sulfato y calcio por la transición de aguas del tipo bicarbonatadas cálcicas a sulfatadas cálcicas de mayor mineralización, a través de tipos de aguas intermedias de mezcla y por otra parte un incremento de los iones calcio y sodio dado por el aumento de la mineralización.

Grupo 2. Constituido por el pozo Bp4 103-206 (aguas HCO₃-Na), el manantial Mil Cumbres, los pozos P2 90m y P3 0-90m (aguas HCO₃-Ca) como casos extremos de cada tipo y Bp4 bombeo, P13 (aguas de mezcla).

En la tabla II se observa que la correlación Ca^{2+} vs SO_4^{2-} muestra un bajo coeficiente de determinación, indicativo de una mala correlación entre estos dos iones, lo que se justifica teniendo en cuenta que este ion no juega un papel importante en este grupo de aguas ya que el mismo involucra fundamentalmente aguas del tipo bicarbonatadas. Por otra parte para la correlación Ca^{2+} vs $\text{Na}^+ + \text{K}^+$ el coeficiente de determinación es significativo, mostrando una buena correlación entre estos iones.

Tabla II. Resultados de las correlaciones lineales entre los iones Ca^{2+} vs SO_4^{2-} y Ca^{2+} vs $\text{Na}^+ + \text{K}^+$, para el Grupo 2.

Iones	Ecuación	Coefficiente de determinación (R^2)
Ca^{2+} vs SO_4^{2-}	$Y = -0.3296 * X + 2.2314$	$R^2 = 0.4546$
Ca^{2+} vs $\text{Na}^+ + \text{K}^+$	$Y = -3.7705 * X + 17.703$	$R^2 = 0.8704$

En las dos líneas de regresión correspondiente al Grupo 2 (Fig. 2 y 3) los datos se orientan según la siguiente secuencia de mezcla: $\text{HCO}_3\text{-Na} \rightarrow \text{HCO}_3\text{-Ca} > \text{Na} \rightarrow \text{HCO}_3\text{-Ca}$. También se puede observar (Fig. 2) la disminución del ion sulfato con el incremento del ion calcio, a pesar de no existir un buen ajuste entre estos dos iones. Por otra parte en la figura 3 se aprecia la relación inversa entre el calcio y el sodio, lo cual concuerda con la secuencia de mezcla.

Grupo 3. Constituido por los pozos Bp4 103-206 (aguas $\text{HCO}_3\text{-Na}$), P1 237-320 (aguas $\text{SO}_4\text{-Ca}$) (como casos extremos) y Bp4 145-195m, P12, P19, los manantiales BM1, BM3, BM4 (Bermejales) (aguas de mezcla).

En la tabla III se observa que la correlación Ca^{2+} vs SO_4^{2-} muestra un elevado coeficiente de determinación, indicativo de una buena correlación entre estos dos iones. Por otra parte para los iones Ca^{2+} vs $\text{Na}^+ + \text{K}^+$ el coeficiente de determinación es bajo, mostrando una escasa correlación entre los mismos, a pesar de que en este grupo existen miembros extremos de mezcla con aguas del tipo $\text{HCO}_3\text{-Na}$, esto podría estar explicado por el gran peso de los iones calcio y sulfato que hacen que es las aguas de mezcla tengan una tendencia preferencial a ser del tipo $\text{SO}_4\text{-Ca}$.

Tabla III. Resultados de las correlaciones lineales entre los iones Ca^{2+} vs SO_4^{2-} y Ca^{2+} vs $\text{Na}^+ + \text{K}^+$, para el Grupo 3.

Iones	Ecuación	Coefficiente de determinación (R^2)
Ca^{2+} vs SO_4^{2-}	$Y=1.242*X+0.3413$	$R^2=0.9643$
Ca^{2+} vs $\text{Na}^+ + \text{K}^+$	$Y=-0.4149*X+13.337$	$R^2=0.5940$

En estas líneas de regresión (Fig. 2 y 3) los datos se orientan según la secuencia: $\text{HCO}_3^- - \text{Na} \rightarrow \text{SO}_4 > \text{HCO}_3^- - \text{Ca} > \text{Na} \rightarrow \text{SO}_4 - \text{Ca} > \text{Na} \rightarrow \text{SO}_4 - \text{Ca}$. Observándose (Fig. 2) la tendencia al incremento de los iones calcio y sulfato y la disminución de los iones $\text{Na}^+ + \text{K}^+$ (Fig. 3) con el incremento de la concentración de Ca^{2+} .

CONCLUSIONES

El análisis bivariado, específicamente los métodos del análisis de correlación y regresión lineal simple presentados en este trabajo, permiten realizar una agrupación de los diferentes tipos de aguas de la Sierra del Rosario, y comprobar una clasificación semejante obtenida en trabajos realizados anteriormente mediante la estadística multivariada.

Se obtienen de esta forma tres grupos fundamentales de aguas en la zona de estudio:

Grupo 1: Constituido por el P1 237-320 (aguas SO_4 -Ca) y el manantial Mil Cumbres, los pozos P2 90m y P3 0-90m (aguas HCO_3 -Ca), como casos extremos de cada tipo (2) de agua, los manantiales El Tigre, El Templado y La Gallina (San Diego de los Baños), los manantiales BM2, BM5 (Bermejales) y el pozo P1 0-122m (aguas de mezcla).

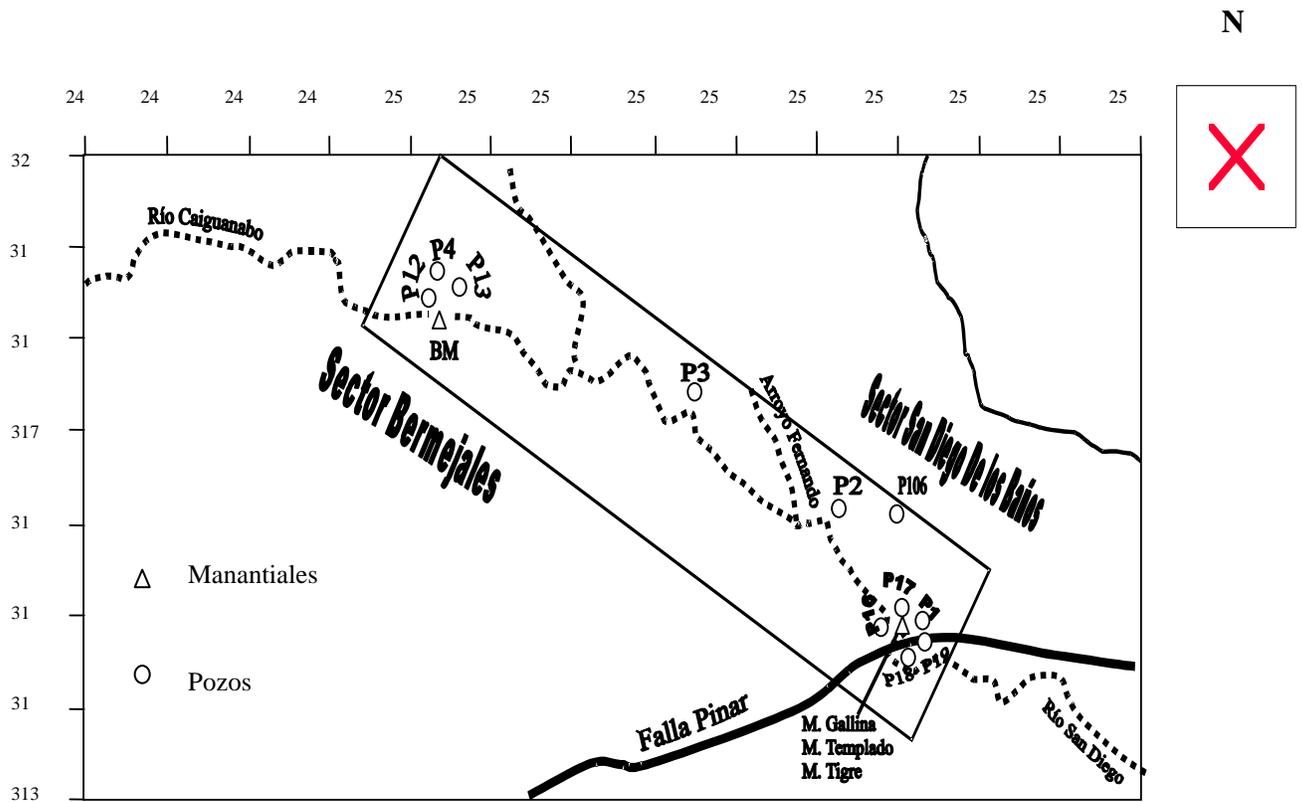
Grupo 2: Constituido por el pozo Bp4 103-206 (aguas HCO_3 -Na), el manantial Mil Cumbres, los pozos P2 90m y P3 0-90m (aguas HCO_3 -Ca) como casos extremos de cada tipo y Bp4 bombeo, P13 (aguas de mezcla).

Grupo 3: Constituido por los pozos Bp4 103-206 (aguas HCO_3 -Na), P1 237-320 (aguas SO_4 -Ca) (como casos extremos) y Bp4 145-195m, P12, P19, los manantiales BM1, BM3, BM4 (Bermejales) (aguas de mezcla).

BIBLIOGRAFÍA

1. APHA – AWWA – WPCF (1992): *Métodos Normalizados para el análisis de Aguas Potables y Aguas Residuales*, Am. Public Assoc., Edición 17th. Editorial Grijalbo (Madrid), 4-1 – 4-235.
- 2 Fagundo, J.R., y J. Rodríguez (1991): “Hidrogeochemical patterns and mathematical correlations in karst at the examples of Cuba”. In *Quaderni del Dipartimento di Geografia*. University of Padova (Italia), 361-369.
- 3 Fagundo J. R., E. Alvarez, I. Vinardell y J. Vega (1992): “Control automatizado de la calidad de las aguas”. En *Proc. XXIII Congreso Interamericano de Ingeniería Sanitaria y Ambiental (CUBAIDIS)*. La Habana. Tomo 1, 98-103.
- 4 Fagundo, J. R., J. J. Valdés y J. Rodríguez (1996): “Hidroquímica del Karst en Climas Extremos”. En *Hidroquímica del Karst*. Ed. OSUNA, Universidad de Granada (España), 121-212.
- 5 Fagundo, J.R. (1998): “Patrones hidrogeoquímicos y relaciones matemáticas en aguas naturales”. En *Ingeniería Hidráulica*. La Habana (Cuba). Vol. XIX (2): 62-79.
- 6 Guerón, J., J. R. Fagundo, I. Abelló y E. Ontivero (1993): “Utilización de las técnicas de regresión en el procesamiento de diferente naturaleza hidrogeoquímica”. En *Libro de Comunicaciones. I Taller sobre Cuencas Experimentales en el Karst, Matanzas (Cuba) 1992*. Ed. Ed. H. J. Llanos, I. Antigüedad, I. Morell y A. Eraso, Universidad de Jaume I (Castellón, España), 195-204.
- 7 Morell, I., E. Giménez, J. R. Fagundo, A. Pulido-Bosh, M. López-Chicano, M. L. Calvache y J. E. Rodríguez (1997): “Hydrogeochemistry and karstification in the Ciénaga de Zapata aquifer, Matanzas (Cuba)”. In *Karst Water and Enviromental Impacts*. Ed.: Gunay and Jhonson, Balkema, Rotterdam, 191-198.

Figura 1. Esquema que muestra la zona de estudio y los sitios de muestreo en el sector hidrogeológico San Diego de los Baños-Bermemjales



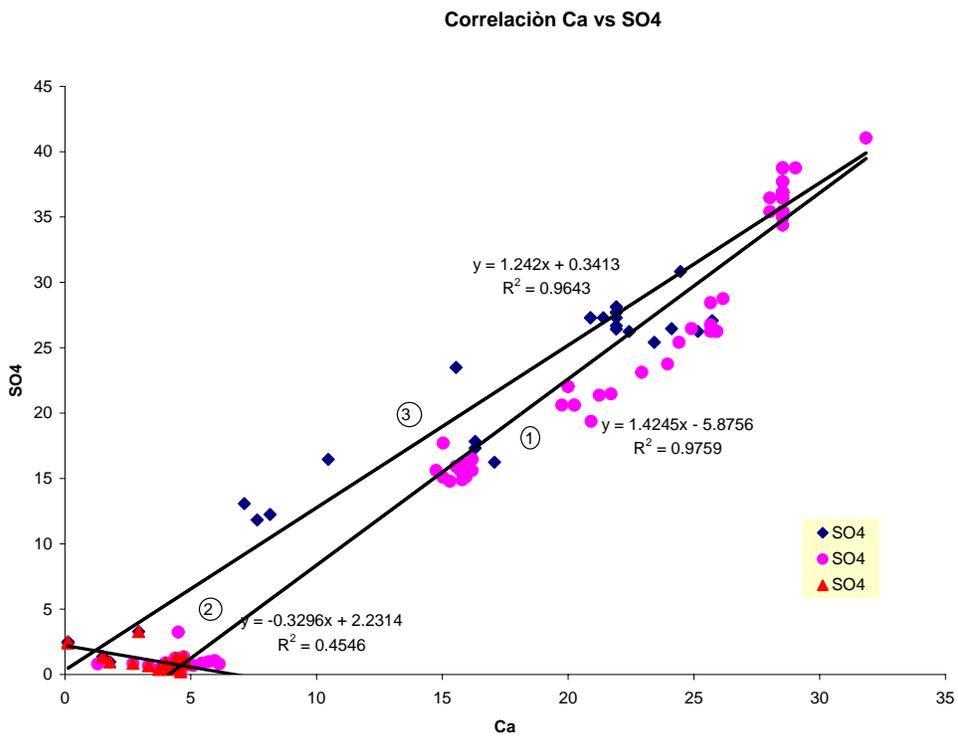


Figura 2. Correlación de sulfato en función de calcio.

Figura 3. Correlación de sulfato en función de calcio.

