

Solución de problemas ambientales mediante la Modelación Hidrogeoquímica

J.R. Fagundo Castillo¹, P. González¹, E. Alvarez Varela², G. Tillán Ochoa²,
I. Vinardell Grandal², J. Fagudo Sierra¹, M. Suárez Muñoz¹, Cl. Melián Rodríguez¹.

1. Centro Nacional de Medicina Natural y Tradicional (CENAMENT). Calle 28, No. 4115 entre 41 y 45, Apto. 22, Playa.
2. Centro Nacional de Investigaciones Científicas (CNIC). Calle 25, esquina 158. E-mail:

RESUMEN: Se describen varios sistemas informáticos (hidrogeoquim, sama, geoquim, batomet, sacan, simucin, modelagua) que han sido diseñados e implementados por el colectivo desde la década de 1980 hasta la fecha y se discuten ejemplos de aplicación en la caracterización y control de la calidad de las aguas subterráneas. los programas de computación se basan en principios de la termodinámica y la cinética química; así como en modelos estadísticos, de reconocimientos de patrones, balance de masa y mezcla de aguas. las versiones más recientes de estos programas se desarrollaron en lenguaje delphi 3 sobre windows.

ABSTRACT: Several informatic systems (HIDROGEOQUIM, SAMA, GEOQUIM, BATOMET, SACAN, SIMUCIN, MODELAGUA), which has been designed and implemented from 1980 to the present year by the collective of this paper are discussed and with application examples about underground water characterization and quality control. These computer programs are based on thermodynamic and kinetics principles as well as statistics, pattern recognition, mass balance and mixing water models. The last programs were developed in DELPHI language version 3 for WINDOWS.

Palabras claves: modelos hidrogeoquímicos, calidad del agua, hidrogeoquímica.

Key works: hydrogeochemical models, water quality, hydrogeochemistry.

INTRODUCCIÓN

Las aguas naturales adquieren su composición química mediante un proceso complejo, donde además de los principios químico-físicos involucrados, intervienen factores de tipo geológico, hidrogeológico, geomorfológico, climático y ambiental. Sin embargo, en un mismo sitio el efecto de estos factores se hace constante y la composición química de las aguas puede ser expresada mediante uno o varios patrones hidrogeoquímicos, los cuales presentan regularidades químico-físicas y matemáticas definidas (1). Esto permite estimar la composición química de dicho sitio, a partir de mediciones sencillas de temperatura, pH y conductividad eléctrica, una vez caracterizado el acuífero o la cuenca y establecidos los modelos de correlación correspondientes con las magnitudes a estimar. Para ello es necesario que los datos hidroquímicos sean determinados de manera sistemática durante al menos un año hidrológico.

Desde la década de 1980, bajo la dirección del autor de este trabajo, el colectivo de trabajo Centro Nacional de Investigaciones Científicas (CNIC) y el Centro Nacional de Medicina Natural y Tradicional (CENAMENT), ha diseñado y creado un grupo de software específicos, basados en principios de la termodinámica la cinética química así como en modelos estadísticos, de reconocimientos de patrones, de balance de masas y mezcla de aguas, con el objetivo de caracterizar y monitorear la calidad de las aguas en acuíferos y cuencas hidrográficas y subterráneas. En este trabajo se describen estos sistemas y se comentan ejemplos de aplicación en algunos sitios de interés.

MATERIALES Y MÉTODOS

Las primeras versiones de estos programas se desarrollaron en lenguaje TURBOPASCAL, mientras que las más recientes en lenguaje DELPHI 3 sobre WINDOWS para microcomputadoras IBM compatibles.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Descripción de los sistemas informáticos y aplicaciones

El sistema informático en su conjunto está integrado por los siguientes programas: HIDROGEOQUIM: Sistema Automatizado para el Procesamiento de datos Hidroquímicos (2): Se trata de un sistema informático nuevo que da continuidad a versiones anteriores (3), basados en modelos termodinámicos y geoquímicos. Es un sistema de procesamiento de datos hidroquímicos con ficheros de datos similares o transformables entre sí a través de los propios software. Su objetivo es procesar datos hidroquímicos con vistas a encontrar propiedades químico-físicas de las aguas que permitan su caracterización espacial desde el punto de vista hidroquímico y obtener índices geoquímicos que faciliten la interpretación de los procesos de interacción de las aguas con el medio físico-geográfico y geológico por donde se mueven; obtener información de carácter hidrogeológico y por último, evaluar la variación temporal de diferentes variables, lo cual brinda información en forma indirecta, de las características del drenaje en la cuenca. A partir de los valores de los principales parámetros químico-físicos, expresa las concentraciones iónicas en diferentes unidades y calcula la dureza, la mineralización en diferentes expresiones, determinando en cada caso los principales estadígrafos de los datos. También determina la conductividad eléctrica teórica según los modelos de Dudley (4) y Miller et al. (5); relaciones iónicas de interés geoquímico; así como los índices de agresividad de las aguas sobre la base de los modelos de Tillman-Trombe y de Back et al (6): CO_2 en equilibrio y relaciones de saturación de la calcita (RSC), la dolomita (RSD) y el yeso (RSY). Permite además, la representación gráfica de temperatura, pH, CO_2 , conductividad eléctrica (CE), mineralización (TSS), CaCO_3 , RSC, RSD y RSY en función del tiempo y de la dureza. También se representan los valores de pH y dureza en el Diagrama de Tillman-Trombe. Las series cronológicas que se muestran en los gráficos pueden ser utilizados para evaluar tendencias y hacer pronósticos sobre la calidad de las aguas de los sitios estudiados. Este sistema accede a las bases de datos PRODAT (7) y TERMADAT (8) y crea ficheros de datos y figuras con los resultados del procesamiento. En las figuras 1 y 2 a se muestran algunas salidas de este sistema.

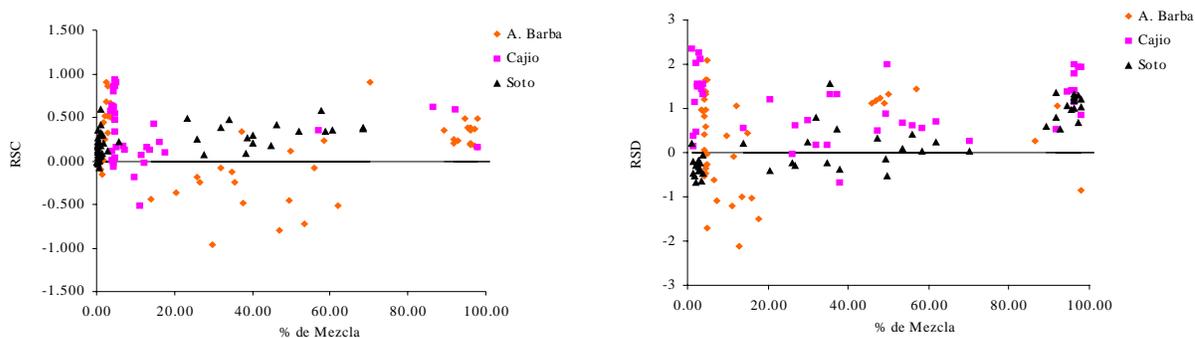


Fig. 1. Variación de las relaciones de saturación (calculadas por HIDROGEOQUIM) con respecto a la calcita (a) y a la dolomita (b) con el porcentaje de mezcla con agua de mar (calculado por MODELAGUA) en la en el período de enero del 1997 a julio de 1998. Sector hidrogeológico Güira – Quivicán.

(a)

(b)

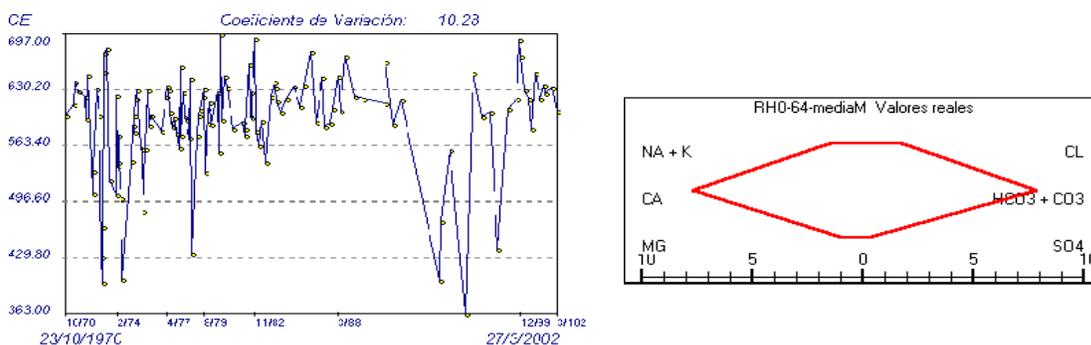


Fig. 2. Variación temporal determinada por HIDROGEOQUIM (a) y patrón hidrogeoquímico determinado por MODELAGUA (b) de las aguas del pozo RHO-64, Llanura Sur de Pinar del Río.

SAMA: Sistema Automatizado para el Monitoreo de las Aguas, determina ecuaciones de dependencia matemática entre la concentración iónica y la conductividad eléctrica según un modelo de regresión matemática de 1^o a 5^o grado que pasa por el origen de coordenadas (9) Las ecuaciones de mejor ajuste pueden ser calculadas por tanteo o en forma automática sobre la base de la prueba de Fisher (también pueden introducirse por teclado ecuaciones calculadas mediante otros software). Se estima la composición química a partir de valores de conductividad, comparándose los resultados reales con los obtenidos por correlación matemática mediante un índice de similitud y diagramas hidroquímicos de Stiff.

Utilizando las ecuaciones determinadas por este sistema es posible controlar la composición química y la mineralización de dichas aguas mediante simples mediciones de conductividad eléctrica. En la figura 3 se presentan una de las salidas de este sistema.

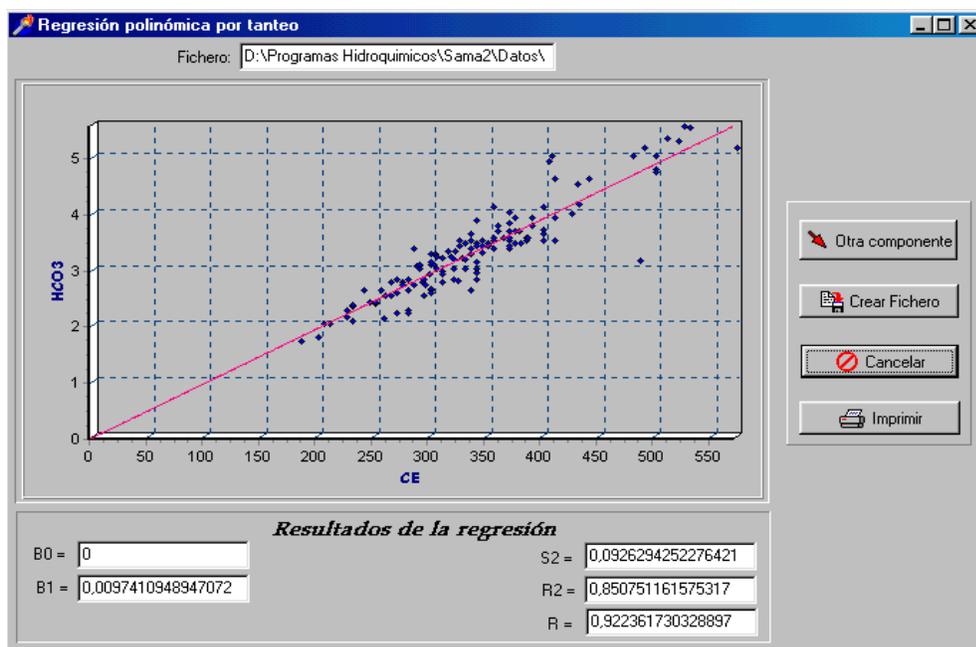


Fig. 4. Relación entre la concentración del ion HCO_3^{2-} y la CE (Determinado con SAMA).

GEOQUIM: Sistema para el procesamiento de datos Geoquímicos y de Calidad de Aguas, es un sistema de procesamiento estadístico que utiliza una base de datos mayor que HIDROGEOQUIM, con el objetivo de correlacionar los diferentes indicadores geoquímicos y de calidad de las aguas (10). Calcula la matriz de correlación de todos los datos, la frecuencia de distribución y los principales estadígrafos de cada variable, así como las ecuaciones de correlación de cada pareja seleccionada. Permite encontrar relaciones recíprocas entre las variables que expresan las propiedades químico-físicas de las aguas (temperatura, pH, conductividad eléctrica, macro y microcomponentes, gases disueltos), así como otros indicadores de calidad de las mismas (turbiedad, color, oxígeno disuelto, demanda química de oxígeno y los componentes del ciclo de nitrógeno). También permite determinar la distribución de frecuencia de esas magnitudes, así como las ecuaciones de regresión correspondientes. El objetivo de este tratamiento estadístico es encontrar asociaciones entre variables que permitan inferir un origen común y el efecto de los diferentes factores que determinan las propiedades químico-físicas y la calidad de las aguas.

BATOMET: Es un sistema automatizado que agrupa los datos por patrones hidrogeoquímicos (determinados mediante relaciones iónicas) y luego, para cada patrón, determina las relaciones entre la concentración de cada ion y la conductividad eléctrica. Programando los rangos de conductividad eléctrica correspondientes a los diferentes patrones se estiman entonces las concentraciones (11).

Tanto SAMA como BATOMET determinan la similitud entre los datos reales y los obtenidos por modelación mediante un índice de similitud. En la figura 5 se ilustra una aplicación del sistema BATOMET en la estimación de la composición química de las aguas en un pozo de control de la intrusión salina.

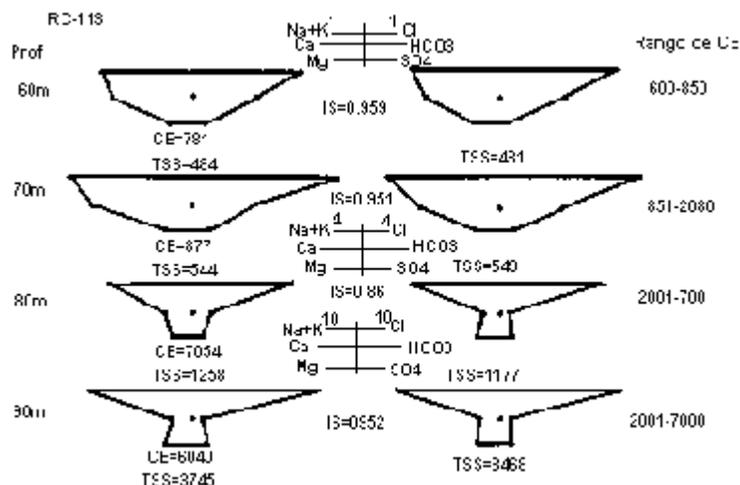


Fig. 5. Resultados de la composición de las aguas obtenidas por análisis químico (izquierda) y modelos de regresión matemática (derecha) en el pozo RC-113 ubicado en la Llanura Meridional de Pinar del Río. Los cálculos fueron realizados con el sistema BATOMET.

SACAN: Sistema Automatizado para la Caracterización de las Aguas Naturales (12) mediante un sistema de reconocimiento de patrones basado en las normas de calidad para distintos usos: potabilidad, agua mineral envasada, agua mineral para uso terapéutico. Permite teclear los datos del tipo de norma o patrón de referencia y representa los datos mediante diagramas de Stiff y diagramas de Defrancesco (13). En la figura 8 se muestra un ejemplo de aplicación de este sistema.

SIMUCIN. Sistema automatizado para la Simulación de los procesos Cinéticos de disolución de minerales (14) y para la simulación matemática: Ha sido diseñado para realizar los cálculos que requiere la cinética de los procesos de interacción agua-roca en experimentos de laboratorio, así como la simulación matemática de los mismos. Mediante varias opciones gráficas, el sistema representa la evolución temporal de la composición química de las aguas, la variación en el tiempo de la constante de velocidad y los resultados de la simulación matemática de los experimentos cinéticos. Utilizando este sistema se puede evaluar con rigor científico el papel del medio rocoso del acuífero en la calidad de las aguas (Figura 6).

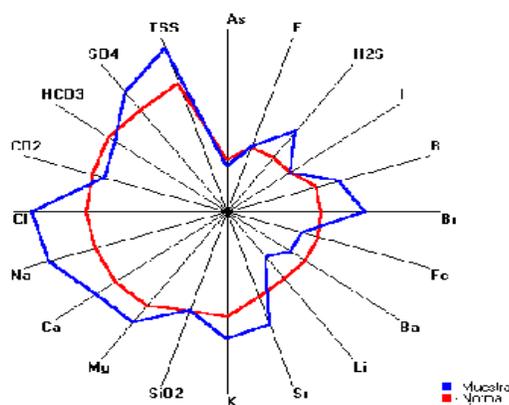


Fig. 6. Diagrama hidroquímico de Defrancesco (obtenido con SACAN) donde se comparan los datos del manantial El Guapo (Balneario Elguea) con la Norma Cubana de Agua Mineral para uso terapéutico.

MODELAGUA: Sistema Automatizado para la Modelación Hidrogeoquímica de las Aguas (15). Determina el origen de la composición química de las aguas mediante modelos de balance de masa y mezcla de aguas; así como los procesos geoquímicos que originan dicha composición. Posibilita el cálculo de los patrones hidrogeoquímicos y grafica tanto los datos reales como los patrones mediante diagramas de Stiff.

El primer paso en el cálculo es la determinación del factor de concentración o el factor de mezcla según el caso, para lo cual es necesario la selección de un ion conservativo (un ion que no participe en ningún proceso). Posteriormente se calcula el delta iónico (la diferencia entre la concentración de cada uno de los iones de la muestra estudiada con el resultado del producto del factor por la concentración de la muestra o muestras de referencia). Finalmente, se determinan los procesos geoquímicos que explican la composición química del agua. En las figuras 1 y 2 b se muestran ejemplos de aplicación de este sistema.

CONCLUSIONES

El sistema informático constituido por los programas de computación HIDROGEOQUIM, SAMA, GEOQUIM, BATOMET, SACAN, SIMUCIN y MODELAGUA, realiza una serie de operaciones las cuales permiten la caracterización hidroquímica de acuíferos y cuencas y el monitoreo la calidad de sus aguas. Los software creados son novedosos y eficientes, se basan en sólidos principios químico-físico e hidrogeológicos

BIBLIOGRAFIA

1. Fagundo J.R. and J.E. Rodríguez (1992): Hydrogeochemical pattern and mathematical correlations in karst at the examples of Cuba. **Quaderni del Dipartimento di Geografia**, **13**, 361-369, 1992.
2. Fagundo J.R., P. González, M. Suárez Muñoz, J. Fagundo-Sierra, C. Melián, E. Alvarez. **HIDROGEOQUIM. Contribución a la Educación y Protección Ambiental, Vol. 6** (Soporte electrónico), 2005.
3. Alvarez, E. y J.R. Fagundo. SAPHIQ, un sistema para el procesamiento automatizado de datos hidroquímicos. **Revista CENIC Ciencias Químicas**, **22**, 59-65, 1991.
4. Dudley, J.R. Reability of Water Analysis. General Technical Department Report. TDR No 09271, pp. 27, 1972.
5. Miller R. L., Bradford W. L., Peters N. E.. Specific conductance: theoretical considerations and application to analytical quantity control. U. S. Geological Survey Water-Supply. Paper: 2311, 21 pp, 1988.
6. Back, W., Cherry, R.N. and Hanshaw, B.B. Chemical equilibrium between the water and minerals of a carbonate aquifer. **Nat. Speleol. Soc. Bull.**, **28**, 119-126, 1966.
7. Servicio Hidrológico Pinar del Río. PRODAT: Sistema de base de datos del Departamento Provincial, 10 p.,1998.
8. Fagundo-Sierra, J., J.R. Fagundo, P. González, M. Suárez, C. Melián. Sistema de base de datos de aguas minerales y mineromedicinales (TERMADAT). **Contribución a la Educación y la Protección Ambiental, Vol. 3** (Soporte electrónico), 2002.
9. Alvarez E., I. Vinardell, J.R. Fagundo, E. Reguera. M.E. Cardoso. Control de la calidad de las aguas mediante un sistema automatizado. **Estudios Geológicos** (Madrid), **46**, 409-414, 1990.
10. Vinardell I., Alvarez E., Iturralde-Vinent M. y Fagundo J.R., (1991) **Aplicación del sistema de programas GEOQUIM a la obtención de criterios para la prospección geoquímica. Revista CENIC Ciencias Químicas, Vol. 22**, 66-68.
11. Vinardell, I., E. Alvarez y J.R. Fagundo. Sistema automatizado para el control de las aguas cársicas afectadas por la intrusión marina mediante reconocimiento de patrones, BATOMET. En: "El Karst y los acuíferos Kársticos, ejemplos y métodos de estudio". Ed. J. Fagundo, A. Pulido Bosch, J. Rodríguez, I. Morell (Univ.Granada): 251-256, 1995.
12. Tillán, G., I. Vinardell, J.R. Fagundo, V. Ferrera, P. González y L. Sánchez. SACAN: Sistema Automatizado para la Caracterización de Aguas Minerales. En: "Contribuciones a la hidrogeología y medio ambiente en Cuba". Eds.: J.R. Fagundo Castillo. D. Pérez Franco, A. Alvarez Nodarse, J.M. García e I. Morell, Universidad de Castellón (España), 113-121, 1996.
13. Defrancesco, F. Aqua. Appunti introduttivi alla scienza, alla tecnica, alla difesa delle acque naturali. Ed TEMI, Trento, 96-103, 1991.
14. Alvarez E. y Fagundo J.R. SIMUCIN: Sistema para el estudio cinético y la modelación de las reacciones de disolución de minerales. En: "El Karst y los acuíferos Kársticos, ejemplos y métodos de estudio". Ed. J. Fagundo, A. Pulido Bosch, J. Rodríguez, I. Morell (Univ. Granada): 209-213, 1995.
15. Fagundo-Sierra, J., J.R. Fagundo, P. González, M. Suárez. **Modelación de las aguas naturales. Contribución a la Educación y la Protección Ambiental, Vol. 2** (Soporte electrónico), 2001.