

SISTEMA INFORMÁTICO PARA LA CARACTERIZACIÓN Y MONITOREO DE LA CALIDAD DE LAS AGUAS SUPERFICIALES Y SUBTERRÁNEAS

J.R. Fagundo Castillo¹, P. González Hernández¹, E. Alvarez Varela², G. Tillán², I. Vinardell Granda², J. Fagundo-Sierra¹, M. Suárez Muñoz¹, C. Melián Rodríguez

¹ Centro Nacional de Medicina Natural y Tradicional (MINSAP)

² Centro Nacional de Investigaciones Científicas (MES)

Resumen

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. Esto permite estimar la composición química de dicho sitio, a partir de mediciones sencillas de temperatura, pH y conductividad eléctrica, una vez 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.

En el trabajo se discuten los principios del método, se describen los software diseñándose implementados (HIDROGEOQUIM, SAMA, GEOQUIM, BATOMET, SACAN, SIMUCIN, MODELAGUA) y se presentan resultados de su aplicación en la estimación de la composición química de las aguas procedentes de diferentes tipos de acuíferos. Los resultados obtenidos por modelación no difieren significativamente los de valores reales.

Antecedentes

Desde la década de 1980, bajo la dirección del autor de este trabajo, se ha diseñado y creado en el Centro Nacional de Investigaciones Científicas (CNIC) primero y el Centro Nacional de Termalismo "Víctor Sanatamarina" (CENTERVISA) después, un grupo de software específicos, basados en principios de la termodinámica la cinética química así como en modelos de reconocimientos de patrones y de balance de masas y mezcla de aguas, con el objetivo de caracterizar y monitorear la calidad de las aguas en acuíferos cársicos. En este trabajo se describen estos sistemas y se comentan ejemplos de aplicación en la caracterización y control de la calidad de las aguas subterráneas que ocurren en acuíferos cársicos.

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

Descripción de los sistemas informáticos

A continuación se relacionan los programas de computación que integran el sistema informático:

1. Sistema Automatizado para el procesamiento de datos hidroquímicos (HIDROGEOQUIM)
2. Sistema Automatizado para el monitoreo de la calidad las aguas (SAMA)
3. Sistema informático para el procesamiento de datos geoquímicos basado en modelos estadísticos (GEOQUIM).
4. Sistema para el monitoreo de la calidad de las aguas en acuíferos costeros (BATOMET).
5. Sistema para la caracterización de las aguas mediante patrones hidrogeoquímicos (SACAN)
6. SIMUCIN. Sistema Automatizado para el procesamiento de datos hidroquímicos obtenidos en la simulación de los procesos cinéticos de interacción agua – roca.
7. MODELAGUA. Modelo para la determinación del origen de la composición química de las aguas naturales.

HIDROGEOQUIM: Se trata de un sistema informático nuevo que da continuidad a la versión anterior de SAPHIQ (Sistema Automatizado para el Procesamiento de datos Hidroquímicos, Alvarez y Fagundo, 1991), así como otros software basados en modelos geoquímicos similares (Fagundo et al, 1986). Es un sistema de procesamiento de datos hidroquímicos (Fagundo-Sierra et al, 2003), que ha sido implementado en Windows, 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 relaciones o 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 hidrológico e 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 (meq/l, mg/l, % meq/l), 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 (1972) y Miller et al. (1988); relaciones iónicas de interés geoquímico; así como los índices de agresividad de las aguas sobre la base de los modelos de Tillman-Trombe: ΔpH , pH de saturación y CO_2 en equilibrio, y de Back y Cols (1966): fuerza iónica, relación de saturación de la calcita (RSC), relación de saturación de la dolomita (RSD), relación de saturación del yeso (RSY) y CO_2 en equilibrio. Permite además, la representación gráfica de temperatura, pH, CO_2 , conductividad eléctrica (CE), mineralización (TSS, $\square\text{Ci}$, $\square\text{m}$), 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 modificado por Muxart. 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. La versión más actualizada de este sistema accede a bases de datos PRODAT (Servicio Hidrológico Pinar del Río, 1998) y TERMADAT (Fagundo-Sierra et al., 2002) y crea ficheros de datos y figuras con los resultados del procesamiento.

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 1ro a 5to grado que pasa por el origen de coordenadas. 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. (Alvarez et al, 1990 a y b; 1999) 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 las figuras 27-30 se muestran algunas salidas de este sistema.

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 SAPHIQ, con el objetivo de correlacionar los diferentes indicadores geoquímicos y de calidad de las aguas. (Vinardell et al, 1991) 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 (Vinardell et al, 1995; 1999)

Para el cálculo del Índice de Similitud entre los datos reales y los obtenidos por modelación, tanto SAMA como BATOMET toman en cuenta el siguiente algoritmo:

$$IS = \sum_{i=1}^n (R1 \square R2) \quad (16)$$

donde:

$R1 = C_{ir} / C_{im}$; C_{ir} : Concentración iónica real; C_{im} : Concentración iónica obtenida por modelación.

$$R2 = C_{ir} / \sum_{i=1}^n (C_{ir}) \quad (17)$$

SACAN: Sistema Automatizado para la Caracterización de las Aguas Naturales (Tillán et al., 1996) 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 (1951) y diagramas de DeFrancesco (1991).

SIMUCIN. Sistema automatizado para la Simulación de los procesos Cinéticos de disolución de minerales 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, relaciones matemáticas entre parámetros; valor de la constante de velocidad k y el exponente empírico n ; determinación de la concentración de los iones involucrados en la reacción cinética y la conductividad eléctrica al cabo del tiempo según los modelos teóricos. 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. (Fagundo et al, 1992 b; Alvarez y Fagundo, 1995).

MODELAGUA: Sistema Automatizado para la Modelación Hidrogeoquímica de las Aguas. 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 (Fagundo-Sierra et al., 2001).

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.

Aplicación de los sistemas informáticos en la caracterización hidrogeoquímica de acuíferos costeros y en monitoreo de la calidad de las aguas en los mismos

El sistema informático SAPHIQ (y más recientemente HIDROGEOQUIM) han sido utilizado para caracterizar las aguas subterráneas en acuíferos cársicos costeros de las provincias de Matanzas (Fagundo et al, 1993 b,c; Ferrera et al, 1995), La Habana (Hernández, 2002), Pinar del Río (Arellano y Fagundo, 1985; pozos cercanos al mar

en la región yesífera de Punta Alegre (Fagundo et al, 1992; 1994), y aguas de presa en la cuenca del Cauto, algunas con un alto grado de salinización (Fagundo et al, 1995 b). También se han aplicado para estudiar el efecto del hombre (sobreeplotación de los acuíferos para el abasto público y agrícola) sobre los acuíferos cársicos costeros (Fagundo y Arellano, 1991, Fagundo y González, 1999). En las figuras 1-3 se muestran algunas salidas del sistema HIDROGEOQUIM. También las series cronológicas mostradas en las figuras 9 y 11 han sido graficadas con este programa.

El sistema SAMA ha sido ampliamente utilizado para el control de la composición química de las aguas en cuencas y redes de control de la calidad de las aguas del INRH, y ejemplos de su aplicación aparecen en varios trabajos (Fagundo y Rodríguez, 1991; 1992; Fagundo et al, 1991; 1992 a; 1993 a, d, 1994, 1995 b); Fagundo, 1997. Las figura 4-8 son representativas de salidas gráfica del sistema SAMA.

El sistema GEOQUIM (Vinardell et al, 1991; Alvarez et al, 1993) también ha sido aplicado para procesar datos de la red de control de calidad del INRH en la región pinareña, junto con SAMA, para determinar ecuaciones de regresión.

El sistema BATOMET ha sido empleado para el control de la calidad de las aguas de los pozos de la red de observaciones sistemáticas del INRH, en las regiones de Bolondrón y Zapata, provincia de Matanzas (Fagundo et al, 1993 b c); en la cuenca Sur de la Habana; (Ferrera et al, 1995) así como de la llanura meridional de Pinar del Río (Fagundo y Rodríguez, 1991). Las aguas cársicas en estos tipos de acuíferos litorales se encuentran estratificadas debido a la mezcla con el agua de mar. Se ha empleado BATOMET, junto con SAPHIQ y SAMA, en la evaluación y control de la salinidad de las aguas de la cuenca del río Cauto (Fagundo et al, 1993; 1995 b) donde las aguas experimentan drásticos cambios de salinidad en breves intervalos de tiempo. En las figuras 13 y 14 se ilustran, mediante diagramas de Stiff, resultados comparativos de la composición química real y la obtenida por BATOMET.

SACAN, hasta el presente ha sido más empleado en el campo de las aguas minerales que en el de las aguas procedentes de acuíferos costeros (Tillán et al. 1995). En la figura 15 se muestra un diagrama creado por SACAN en el cual se comparan los datos hidroquímicos de una muestra de agua tomada en un pozo perforado en el yacimiento de San Miguel de los Baños con los datos correspondientes a la norma Cubana de Agua Mineral.

SIMUCIN ha sido utilizado para simular los procesos cinéticos de interacción entre las aguas naturales y las rocas de los materiales acuíferos cársicos. (Alvarez et al 1996; Fagundo et al, 1992 b; Alvarez y Fagundo, 1995), incluyendo experimentos en condiciones de mezcla con agua de mar. En las figuras 16 y 17 se ilustran los resultados del procesamiento por SIMUCIN de los datos correspondientes a experimentos de simulación en el laboratorio de una caliza en condiciones de sistema abierto y cerrado respecto al CO₂ respectivamente.

Recientemente, la aplicación de MODELAGUA ha permitido determinar el origen de la composición química de las aguas en acuíferos cársicos costeros; así como los procesos geoquímicos que originan dicha composición (Fagundo et al, 2001). Los

principales procesos son: disolución de calcita y dolomita, precipitación de calcita, dolomitización, reducción anaeróbica de sulfato e intercambio iónico, tanto directo como inverso (Fagundo et al, 1999; González et al, 1999; González, 2003). En las figuras 18 y 19 se muestran salidas gráficas de este programa y los resultados de cálculos de balance de masa y mezcla de agua se presentan en las tablas 1 y 2. Finalmente, en la figura 20 se ilustra la variación de los plus o déficit (Σ iónicos) de los iones SO_4^{2-} y Ca^{2+} con el porcentaje de agua de mar en la mezcla agua dulce – agua de mar en un acuífero cársico costero con intrusión marina).

CONCLUSIONES

En resumen, estos sistemas ofrecen ventajas en la caracterización hidrogeoquímica de cuencas y redes de control de calidad. Por otra parte permiten evaluar los diferentes tipos de aguas, su variación estacional en diferentes intervalos de tiempo y su estado respecto al equilibrio de los minerales constitutivos del material acuífero (grado de agresividad y saturación respecto a los minerales constituyentes de las rocas por donde discurren dichas aguas).

El empleo de los sistemas SAPHIQ e HIDROGEOQUIM ha permitido realizar estudios hidrogeoquímicos con más rigor científico; chequear la precisión de los datos y corregir valores defectuosos, obtener una serie de estadígrafos que han facilitado la comprensión de las propiedades de los acuíferos. Mediante estos sistemas se obtuvieron correlaciones gráficas en función del tiempo de muchas variables hidroquímicas; así como el coeficiente de variación de la mineralización, lo que facilitó la interpretación del comportamiento de las aguas con relación a los efectos externos (régimen de lluvia, temperatura, etc.).

El empleo del sistema informático MODELAGUA ha posibilitado la determinación cuantitativa de los procesos geoquímicos que controlan la composición química de las aguas en los acuíferos cársicos costeros afectado por la intrusión marina: disolución de calcita y dolomita, precipitación de calcita, dolomitización, reducción anaeróbica de sulfato e intercambio iónico, tanto directo como inverso (Fagundo et al, 1999; 2002; González et al 1999. González, 2003).

Una vez caracterizadas desde el punto de vista hidroquímico, las cuencas y redes de control de la calidad estudiadas, el empleo del SAMA brindó la posibilidad de diseñar un sistema para el monitoreo automatizado de la calidad de esas aguas mediante simples mediciones de conductividad eléctrica, utilizando para ello relaciones de dependencia matemática entre esta magnitud y la concentración iónica.

Mediante el empleo de GEOQUIM se realizó el procesamiento estadístico de datos hidroquímicos que poseían por presentar un número apreciable de parámetros (macro y micro constituyentes así como índices de calidad) y se determinaron ecuaciones de regresión lineal con intercepto diferente de cero, las cuales se emplearon en el control automatizado de las aguas.

El sistema BATOMET se ha utilizado para caracterizar y controlar la calidad de las aguas cársicas litorales afectadas por la intrusión marina. Su empleo permitió controlar la composición química de las aguas en condiciones estáticas (muestreadas mediante hidrocaptos verticales o batímetros). Para ello se realizaron las mediciones con un conductímetro acoplado a un electrodo de conductividad a través de una sonda de 100 m de profundidad.

El sistema SIMUCIN ha sido de gran utilidad para estudiar los procesos cinéticos de interacción agua-roca, que fueron desarrollados en el laboratorio con el objetivo de simular los procesos naturales en acuíferos cársicos litorales afectados por la intrusión marina.

Los software creados constituyen una herramienta muy útil para la caracterización, monitoreo y control automatizado de la calidad de las aguas naturales y en especial, aquellas que discurren en los acuíferos cársicos costeros. Los mismos son novedosos y eficientes, se basan en sólidos principios químico-físico e hidrogeológicos. Los resultados del trabajo en que han sido aplicados han recibido una gran acogida en la comunidad científica nacional y extranjera, resolviendo problemas de carácter práctico. Su introducción en el país está siendo llevada a cabo por el Instituto Nacional de Recursos Hidráulicos y ha comenzado a emplearse en el campo del Termalismo y la docencia. Algunos de estos programas ya son conocidos y aplicados en algunos países de América y Europa.

BIBLIOGRAFIA

- Alvarez E., I. Vinardell, J.R. Fagundo, E. Reguera, M.E. Cardoso (1990a). Evolución química y relaciones empíricas en aguas naturales. II- Sistema Automatizado para el Monitoreo de las Aguas. *Voluntad Hidráulica*, 83: 15-25.
- Alvarez E., I. Vinardell, J.R. Fagundo, E. Reguera. M.E. Cardoso (1990b). Control de la calidad de las aguas mediante un sistema automatizado. *Estudios Geológicos (Madrid)*, 46 (5-6): 409-414.
- Alvarez, E. y J.R. Fagundo (1991). SAPHIQ, un sistema para el procesamiento automatizado de datos hidroquímicos. *Revista CENIC Ciencias Químicas*, 22 (1): 59-65.
- Alvarez, E., I. Vinardell, J.R. Fagundo, J.E. Rodríguez. Sistemas para el procesamiento de datos hidroquímicos: SAPHIQ, GEOQUIM, SAMA y BATOMET. Libro de Comunicaciones I Taller sobre Cuencas Experimentales en el Karst, Matanzas 1992). Ed. Univ. Jaume I, Castellón (España): 189-194, 1993.
- Alvarez E. y Fagundo J.R. (1995). 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.
- Alvarez, E., J.R. Fagundo, P. González, V. Ferrera, G. Benítez (1996). Aplicación de métodos de simulación química y matemática al estudio de la disolución de carbonatos en diferentes condiciones experimentales. 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), 91-103.

Alvarez, E, J.R. Fagundo e I. Vinardell. (1999). Control automatizado de la calidad de las aguas y sus variables químico-físicas. Revista CNIC Ciencias Químicas, 30 (1): 21-27.

Arellano, M. Y J.R. Fagundo. Criterio acerca de la zonación geoquímica de un acuífero cársico mediante índices químico-físicos, parámetros hidroquímicos y relaciones iónicas. Voluntad Hidráulica, 66: 2-13, 1985.

Back, W., Cherry, R.N. and Hanshaw, B.B. (1966). Chemical equilibrium between the water and minerals of a carbonate aquifer. Nat. Speleol. Soc. Bull., 28 (3): 119-126.

Defrancesco, F. (1991). Aqua. Appunti introduttivi alla scienza, alla tecnica, alla difesa delle acque naturali. Ed TEMI, Trento, 96-103.

Dudley, J.R. (1972). Reability of Water Analysis. General Technical Department Report. TDR No 09271, pp. 27.

Fagundo, J.R. , J.J. Valdés, M.E. Cardoso, A. de la Cruz (1986). Algoritmo para el cálculo de parámetros e índices químico-físicos y geoquímicos en aguas naturales altamente mineralizadas. Revista CENIC Ciencias Químicas, 12 (1/2), 72-76.

Fagundo, J. R. and J.E. Rodríguez (1991). Hydrochemical pattern and mathematical correlations in karst at the examples of Pinar del Río Province, Cuba. Studia Carsologica (Brno), 4: 29-34.

Fagundo J.R. and J.E. Rodríguez (1992): Hydrogeochemical pattern and mathematical correlations in karst at the examples of Cuba. Proc. of the Int. Conference on Environmental Changes in Karst Areas. Univ. Padova (Italy) 1991; Quaderni del Dipartimento di Geografia (13): 361-369; (1992): Newsletters 1992, IGCP-299, Guillin (China): 41-45.

Fagundo J.R., Alvarez E., Vinardell I. y Vega J. (1992 a). Control automatizado de la calidad de las aguas. Proceeding. del XXIII Congreso Interamericano de Ingeniería Sanitaria y Ambiental. C. Habana 1992, Parte I: 98-103.

Fagundo J.R., Alvarez E., Benítez G., Ferrera V., y Vega J. (1992 b). Simulación química y matemática de la disolución de rocas carbonatadas por las aguas naturales. Proceeding. del XXIII Congreso Interamericano de Ingeniería Sanitaria y Ambiental. C. Habana 1992, Parte I: 152-157

Fagundo, J.R., M. Arellano, G. Benítez, A. Surí, C. Avilé, V. Ferrera, M. Torres (1993). Cambios hidrogeoquímicos por sobreexplotación de acuíferos cársicos. Libro de Comunicaciones I Taller sobre Cuencas Experimentales en el Karst, Matanzas 1992). Ed. Univ. Jaume I, Castellón (España): 141-148.

Fagundo, J. R., J. Rodríguez, G. Benítez, W. Morera, C. Fernández y J. Vega (1993). Caracterización Hidroquímica y control de la calidad de las aguas del curso de la cuenca Zapata. Libro de Comunicaciones I Taller sobre Cuencas Experimentales en el Karst, Matanzas 1992). Ed. Univ. Jaume I, Castellón (España): 73-81.

Fagundo J.R., Ferrera V., Alvarez E., Vinardell I., Torres A. Y Alvarez J. (1995). Control automatizado de la calidad de las aguas mediante patrones hidrogeoquímico y mediciones de conductividad eléctrica en el ejemplo de la cuenca del Cauto. Proceeding del II Congreso de AIDIS de Norteamérica y el Caribe y IV Congreso de

la Asociación de Ingeniería Sanitaria y Ambiental. Santiago de Cuba 1995. Tomo I, 106-114.

Fagundo, J.R. y D.M. Arellano. Hydrogeochemical impacts of coastal karstified aquifer overdrawals. *Studia Carsologica* (Brno), 5: 37- 47, 1991.

Fagundo et al, 1993 a, b,c; (Fagundo et al, 1993 b c) BATOMET

Fagundo, J. R., J.E. Rodríguez, J. de la Torre, J.A. Arencibia, P. Forti (1994). Hydrologic and hydrochemical characterization of the Punta Alegre Gypsum Karst Massif, Cuba. *Newsletter Geology, Climate and Karst Formation, Guilin (China)*, 95-106.

Fagundo. J.R. Sistemas Automatizados para el tratamiento de datos hidroquímicos en zonas costeras. En: A. González, J.R. Fagundo. "Técnicas Automatizadas de Control". Curso en el marco del Proyecto Iberoamericano "Evaluación automatizada de la Respuesta Hidrogeoquímica de los Acuíferos Cársicos Costeros ante el Impacto del Hombre y los Cambios Globales". Tomo 1, 24 pp., Ed. Universidad de Huelva (España), 1997.

Fagundo et al, 1995 b.

Fagundo, J.R and P. Gonzalez (1999). "Agricultural use and water quality at karstic west Cuban Southern Plain". In: *Karst and Agriculture in the World. International Journal of Speleology* (ISSN 0392-6672): 28 B (1/4): 175-185.

Fagundo, J.R., P. González, S. Jiménez, M. Suárez, J. Fagundo-Sierra, A. González, E. Romero, D. Orihuela (2002). Procesos geoquímicos naturales e inducidos por el hombre en acuíferos kársticos costeros. Caso de estudio: Sector hidrogeológico Güira Quivicán (Cuenca Sur de La Habana). *Revista Latinoamericana de Hidrogeología* (2): 71-79.

Fagundo, J.R, P. González, G. Benítez, S. Jiménez, V. Ferrera, A. González, E. Romero y D. Orihuela (1999). "Geoquímica del acuífero Güira-Quivicán (Cuenca Sur de la Habana)". *Ingeniería Hidráulica*, 20 (3): 34-40, ISSN 0253-0678.

Fagundo-Sierra, J., J.R. Fagundo, P. González, M. Suárez (2001). Modelación de las aguas naturales. En: *Memorias del VII. Taller de la Cátedra de Medio Ambiente, ISCTN, La Habana. ISBN 959-7136-13-9* (en soporte electrónico).

Fagundo-Sierra, J., J.R. Fagundo, P. González, M. Suárez, C. Melián (2002). Sistema de base de datos de aguas minerales y mineromedicinales (TERMADAT). En: *Contribución a la Educación y la Protección Ambiental*, 2002. ISBN 959-7136-13-9 (en soporte electrónico).

Fagundo-Sierra, J.E. Alvarez, I. Vinardell, J.R. Fagundo, P. González (2003). *HIDROGEOQUIM: Un sistema informático para la caracterización y control de la calidad de aguas naturales y mineromedicinales*. Inédito.

Ferrera, V., J.R. Fagundo, G. Benítez y J. Vega (1995). Caracterización de las aguas de la cuenca cársica costera Sur. Tramo Güira-Quivicán (Provincia Habana). En: "El Karst y los acuíferos Kársticos, ejemplos y métodos de estudio". Ed. A. Pulido Bosch, J.R. Fagundo, J. Rodríguez, Univ. Granada (España), 227-238.

González, P., J.R. Fagundo, G. Benítez, M. Suárez y J. Ramírez (1999). "Influencia de la reducción de sulfatos en los procesos de disolución y precipitación de

carbonatos en un acuífero cársico costero". Ingeniería Hidráulica, 20 (3), 41-46, ISSN 0253-0678.

González, P. (2003). Contribución al conocimiento hidrogeoquímico de acuíferos cársicos costeros con intrusión marina. Sector Guira – Quivián, Cuenca Sur de La Habana. Tesis e opción Doctoral en Ciencias Técnica. ISPJAE.

Hernández, (2002). Caracterización hidrogeoquímica de la cuenca hidrogeológica Sur de Pinar del Río. Tesis de Maestría.

Miller R. L., Bradford W. L., Peters N. E., (1988). Specific conductance: theoretical considerations and application to analytical quantity control. U. S. Geological Survey Water-Supply Paper: 2311, 21 pp.

Tillán, G., I. Vinardell, J.R. Fagundo, V. Ferrera, P. González y L. Sánchez. SACAN: Sistema Automatizado para la Caracterización de Aguas Minerales (1996). 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.

Servicio Hidrológico Pinar del Río (1998). Datos del Departamento Provincial.

Stiff H.A. (1951). The interpretation of chemical water analysis by means of pattern. Petroleum Technology. 3: 15-17.

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 (1), 66-68.

Vinardell I., E. Alvarez y J.R. Fagundo, (1995). 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.

SAPHIQ - [Contenido del Fichero D:\Programas Hidroquimicos\Saphiq\Datos\Calizafg.txt]

Lectura Cálculos Numéricos Gráficos Ayuda Ventanas Salir

No.	Muestra	Fecha	Hora	T °C	pH	CE	CO2	HCO3	CO3	Cl	SO4	Ca	Mg	Na+K	CaCO3
01	A. Dep Sup	24/01/1984	17:25	20.4	7.45	250	5.5	2.37	0.00	0.42	0.24	2.10	0.38	0.55	124
02	S. Ancon	24/01/1984	12:35	22.6	7.75	350	7.9	3.45	0.00	0.50	0.14	3.26	0.18	0.65	172
03	R. Canilla	24/01/1984	11:00	22.2	7.85	320	4.8	3.00	0.00	0.48	0.16	2.62	0.42	0.60	152
04	S. Aguad M	26/01/1984	15:30	21.0	8.20	370	0.0	3.40	0.00	0.55	0.30	3.18	0.52	0.55	174
05	A. Mineros	26/01/1984	17:00	21.0	7.60	530	10.0	5.50	0.00	0.55	0.04	4.36	0.68	1.05	251
06	C. Mamey d	26/01/1984	20:00	22.0	8.10	340	1.1	3.10	0.00	0.48	0.06	2.64	0.42	0.58	152
07	M. Aguad M	26/01/1984	15:20	20.2	8.15	370	0.0	3.50	0.00	0.58	0.30	3.16	0.44	0.78	174
08	Mamey r Si	26/01/1984	20:00	22.0	8.00	340	2.2	2.80	0.00	0.52	0.26	2.46	0.48	0.64	147
09	Canilla2 g	28/01/1984	15:00	22.0	8.35	280	0.0	2.25	0.00	0.57	0.10	2.42	0.43	0.07	143

	T °C	pH	CE	CO2	HCO3	CO3	Cl	SO4	Ca	Mg	Na+K
Media	22.37	7.67	339	8.20	3.30	0.01	0.45	0.17	2.87	0.45	0.60
Minimo	16.80	6.40	185	0.00	1.70	0.00	0.11	0.00	1.33	0.10	0.06
Maximo	24.40	8.45	572	53.90	5.53	0.80	0.86	0.56	5.08	1.52	1.22
Desv.St.	0.96	0.39	72.92	8.97	0.79	0.07	0.11	0.14	0.68	0.21	0.27

Ok Cancelar Imprimir

Fig. 1. Entrada de datos del sistema HIDROGEOQIM. El fichero contempla: nombre de la muestra, fecha, hora, T, pH, CE, contenido de CO₂ (mg/l), composición iónica (HCO₃²⁻, CO₃²⁻, Cl⁻, SO₄²⁻, Ca²⁺, Mg²⁺, Na⁺ + K⁺ en meq/l) y dureza (mg/l).

Modelo de Miller Fichero: D:\Programas Hidroqui...

Factor exponencial: 0.9791 Calcular

No.	CE Real	CE Teórica	Error(%)
1	320	318	0.47
2	350	356	1.73
3	250	270	7.98
4	370	377	1.79
5	340	314	7.66
6	340	317	6.76

Ok Cancelar Imprimir

Fig. 2. Cálculo de la CE teórica y del error analítico de la muestra mediante HIDROGEOQIM. Deben despreciarse aquellas que posean un error superior al 10 %.

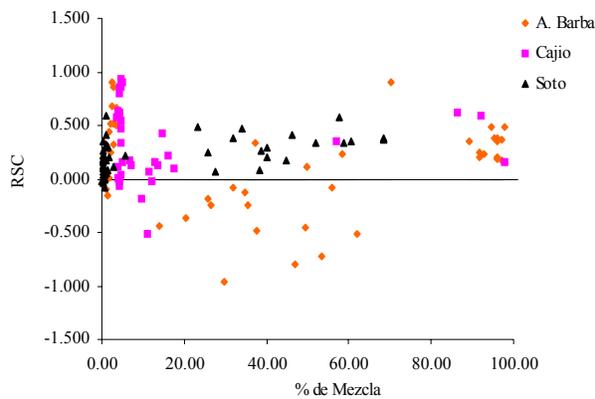
Modelo de Back Fichero: D:\Programas Hidroquimicos\Saphiq\

No.	I	RSC	RSD	RSY	CO2
1	0.00509	0.36607	0.03708	-2.71612	3.91778
2	0.00571	0.41896	-0.31521	-2.70001	5.62521
3	0.00428	-0.23771	-1.14110	-2.60366	8.10593
4	0.00608	0.75888	0.73908	-2.39250	2.29588
5	0.00501	0.45259	0.29382	-2.53001	2.58269
6	0.00506	0.62400	0.54824	-3.13977	2.25394
7	0.00500	0.00000	0.00000	0.00000	1.00000

	I	RSC	RSD	RSY	CO2
Media	0.00549	0.23695	-0.25622	-2.50718	11.00358
Minimo	0.00308	-0.83220	-2.50438	-3.65103	0.71347
Maximo	0.00890	1.00997	1.54118	-1.35163	151.97437
Desv.St.	0.00115	0.36924	0.72496	0.52932	17.38330

Fig. 3. Cálculo mediante HIDROGEOQUIM de las relaciones de saturación respecto a los minerales calcita (RSC), dolomita (RSD) y yeso (RSY), así como la concentración de CO₂ teórica.

a)



b)

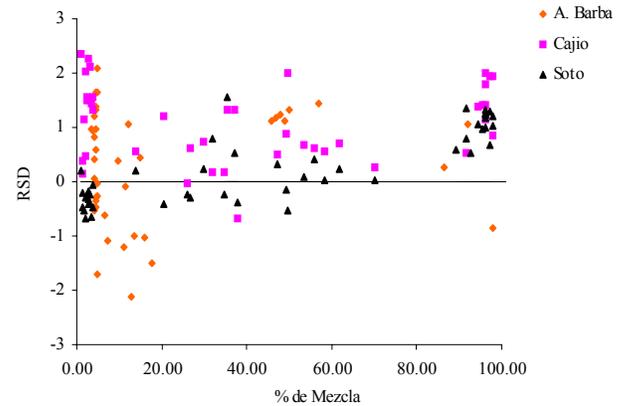


Figura 4. Variación de las relaciones de saturación con respecto a la calcita (a) y a la dolomita (b) con el porcentaje de agua de mar en la mezcla en el período de enero del 1997 a julio de 1998. Sector hidrogeológico Güira – Quivicán.

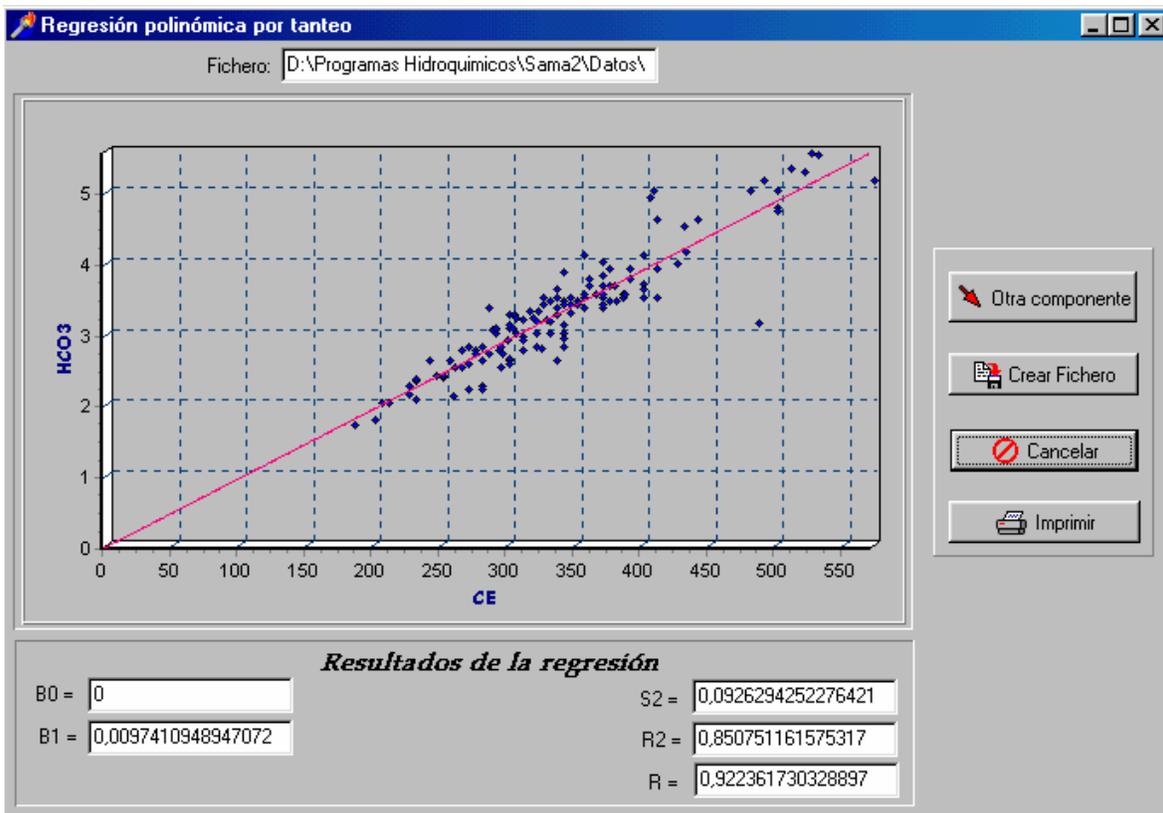


Fig. 5. Relación entre la concentración del ion HCO_3^{2-} y la CE.

Fichero del Modelo

Fichero: D:\Programas Hidroquimicos\Sama2\Datos\Calizafag.mod

	B0	B1	B2	B3	B4	B5
HCO3	0.00000000000000	0.0097410948947	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000
Cl	0.00000000000000	0.0012838741532	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000
SO4	0.00000000000000	0.0004949803115	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000
Ca	0.00000000000000	0.0084655899554	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000
Mg	0.00000000000000	0.0013078497723	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000
Na+K	0.00000000000000	0.0017644912004	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000	0.00000000000000

OK Imprimir

Fig. 6. Valores de las correspondientes relaciones matemáticas (modelo de la línea recta que pasa por el origen de coordenadas).

Muestra	HCO3	Cl	SO4	Ca	Mg	Na+K	TSS	IS
1	3.10646	0.44387	0.16657	2.70592	0.42466	0.57956	285.79079	0.96518
2	3.40614	0.46439	0.17699	2.96294	0.46071	0.62455	311.90807	0.93387
3	2.41295	0.38183	0.13876	2.10854	0.33801	0.46832	224.40386	0.94822
4	3.60677	0.47603	0.18344	3.13461	0.48439	0.65365	329.25605	0.94107
5	3.30608	0.45795	0.17362	2.87720	0.44877	0.60973	303.21502	0.86100
6	3.30608	0.45795	0.17362	2.87720	0.44877	0.60973	303.21502	0.92756
7	3.60677	0.47603	0.18344	3.13461	0.48439	0.65365	329.25605	0.93487
8	5.23624	0.51030	0.22055	4.51806	0.66345	0.86044	466.22514	0.94295
9	1.92247	0.32543	0.11593	1.68377	0.27397	0.38350	180.17122	0.83554
10	1.77610	0.30655	0.10859	1.55665	0.25441	0.35719	166.83861	0.85767
11	2.21628	0.36047	0.12992	1.93844	0.31260	0.43492	206.74940	0.92977

Indice de Similitud Promedio: 0.90027

Fig. 7. Estimación de la composición química y el índice de similitud entre los datos reales y los obtenidos por modelación.

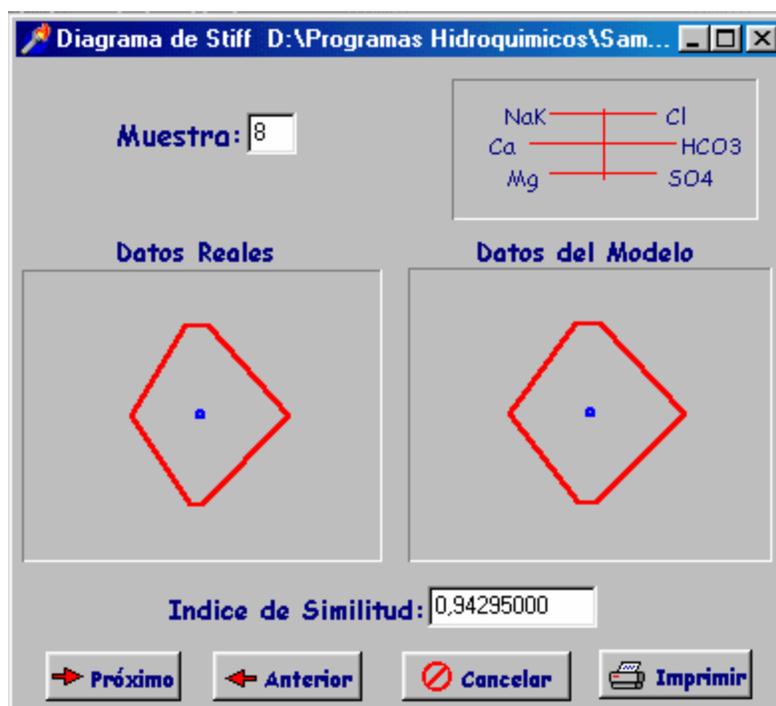


Fig. 8. Diagramas hidroquímicos de Stiff que muestran en forma comparativa, los datos obtenidos por análisis químico y por modelación.

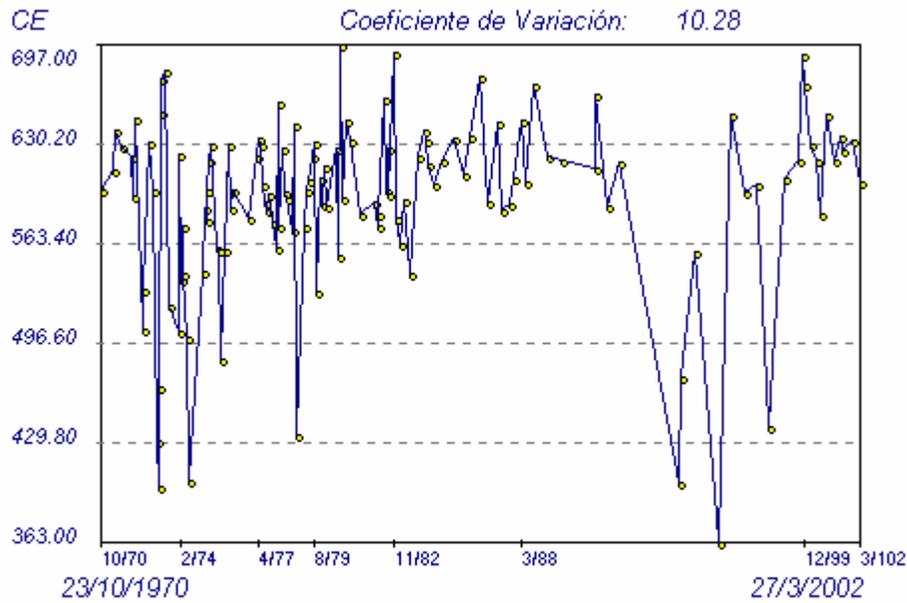
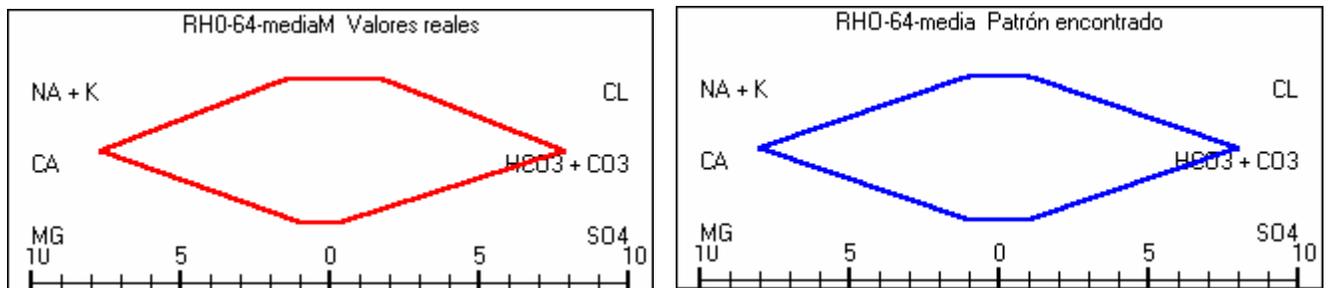


Figura 9. Variación temporal de la conductividad eléctrica de las aguas del pozo RHO-64, Llanura Sur de Pinar del Río.

RHO-64-5, PH: 361-361, N = 1 (modelación)



RHO-64 media, PH: 181-181, N = 105 (modelación)

RHO-64 media, PH: 181-181, N = 18 (validación)

Figura 10. Patrones hidrogeoquímicos de las aguas del pozo RHO-64. Izquierda: valores medios de los datos utilizados para la modelación; derecha: valores medios de los datos utilizados para la validación de los modelos.

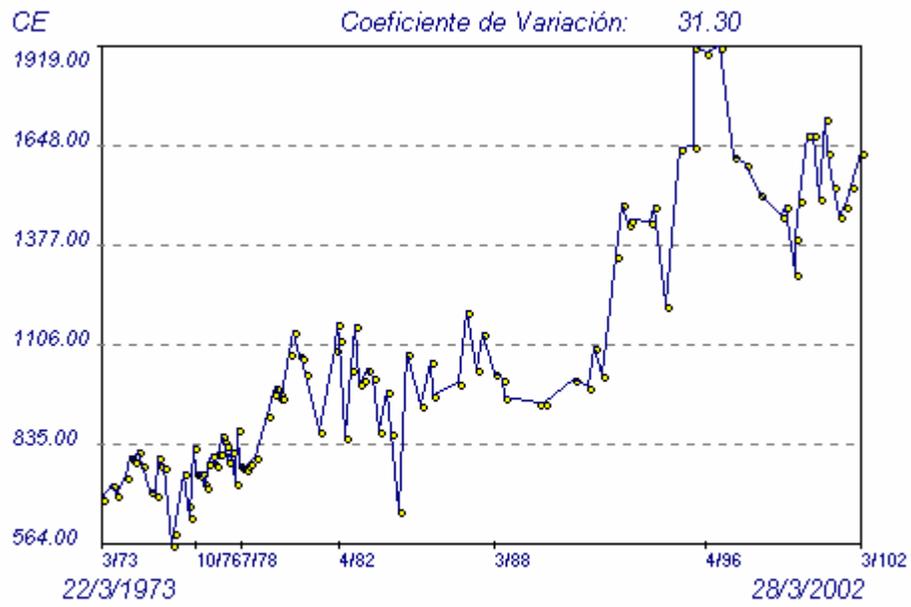


Figura 11. Variación temporal de la conductividad eléctrica de las aguas del pozo RSC-7, Llanura Sur de Pinar del Río.

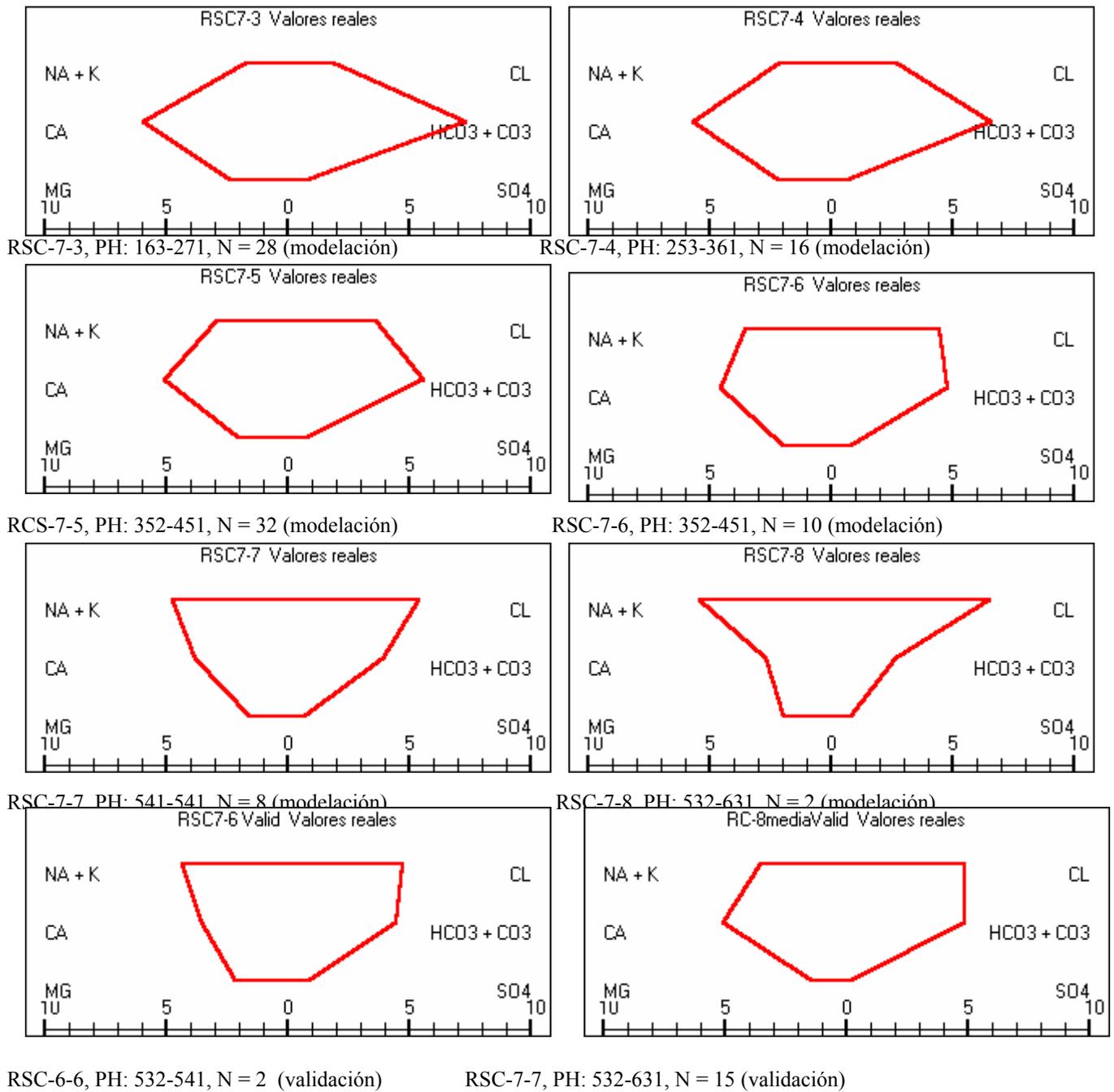


Figura 12. Patrones hidrogeoquímicos de las aguas del pozo RSC-7, Llanura Sur de Pinar del Río. En este caso el mejor ajuste se obtiene mediante el modelo de la línea recta con intercepto diferente de cero ($y = a_0 + a_1 x$); el polinomio de segundo grado ($y = a_1 x + a_2 x^2$), o mediante la línea recta que pasa por el origen de coordenadas, separando previamente de los datos con un sistema de reconocimiento de patrones.

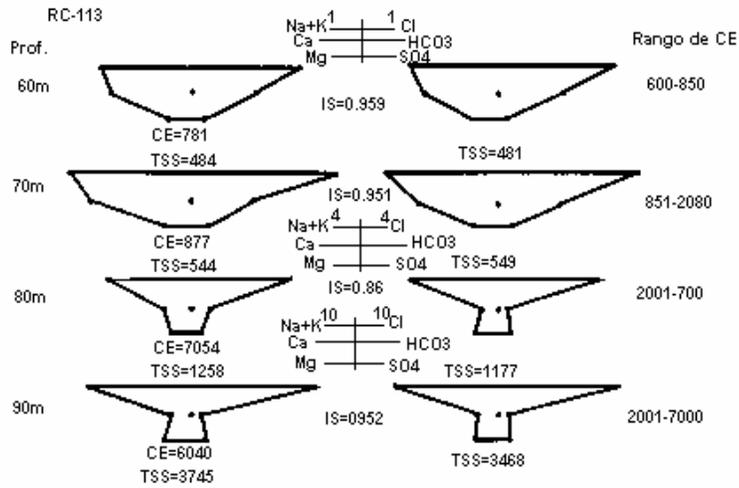


Figura 13. Resultados de la composición de las aguas obtenidas por análisis químico (izquierda) y modelos de regresión matemática (derecha) en el pozo RC-113 ubicado en la Llanura Meridional de Pinar del Río.

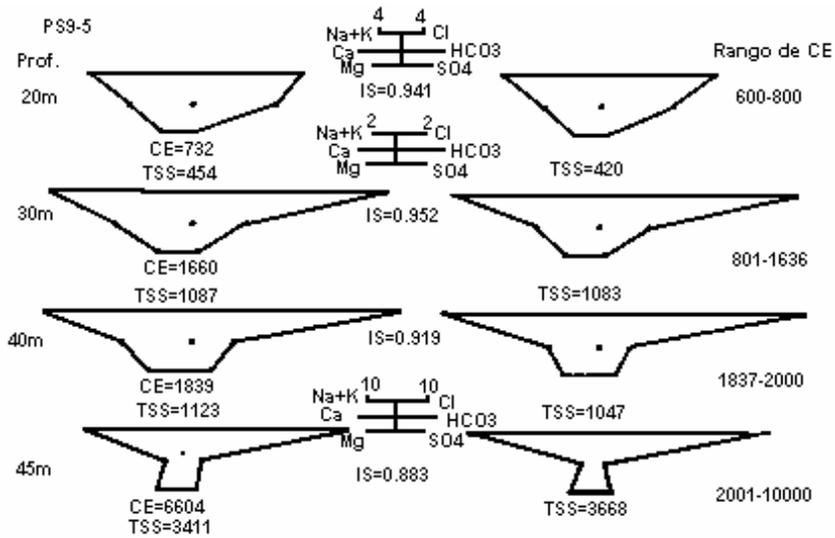


Figura 14. Resultados de la composición de las aguas obtenidas por análisis químico (izquierda) y modelos de regresión matemática (derecha) en el pozo PS9-5 ubicado en la Llanura Meridional de Pinar del Río.

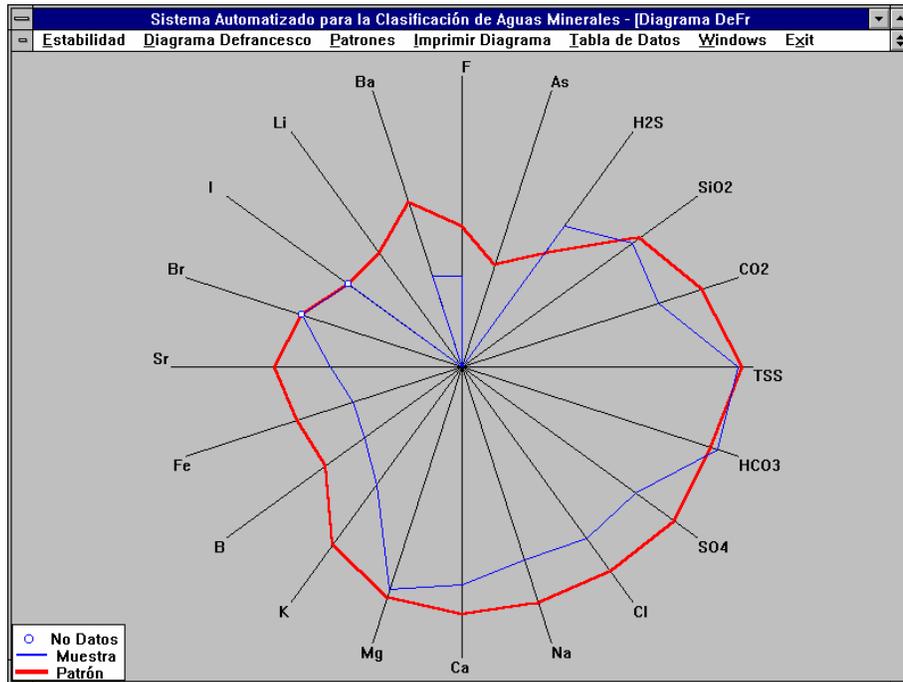


Figura 15. Diagrama Hidroquímico DeFrancisco donde se comparan los datos del pozo PH10 de San Miguel de los Baños con la Norma Cubana de Agua Mineral.

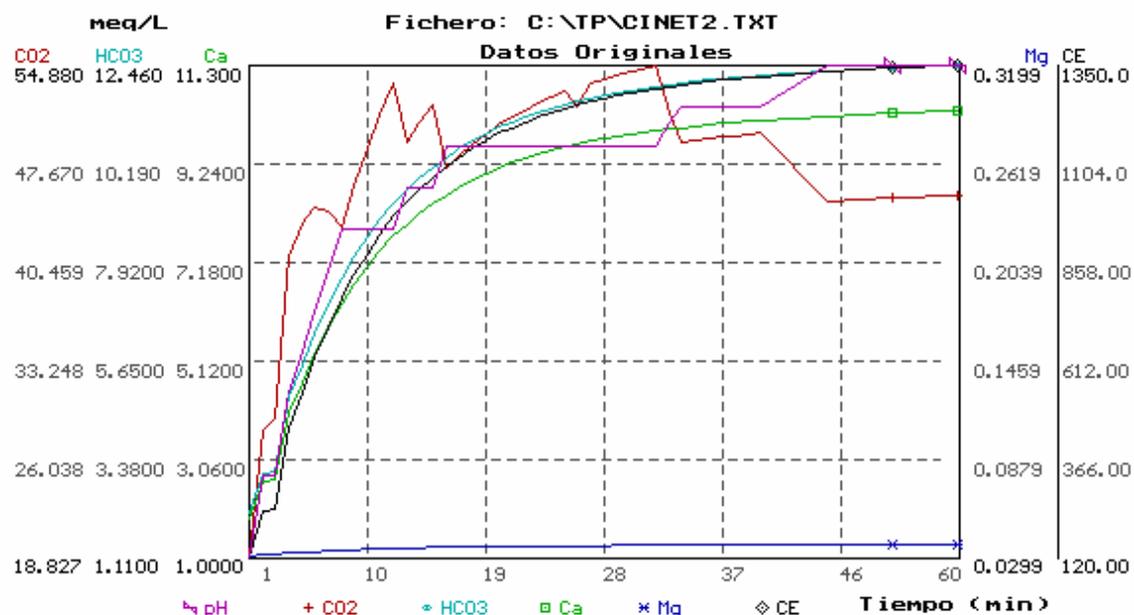


Figura 16. Evolución en el tiempo de las concentraciones de CO_2 , HCO_3^- , Ca^{2+} y Mg^{2+} , del pH y la conductividad eléctrica del fichero Cinet2.

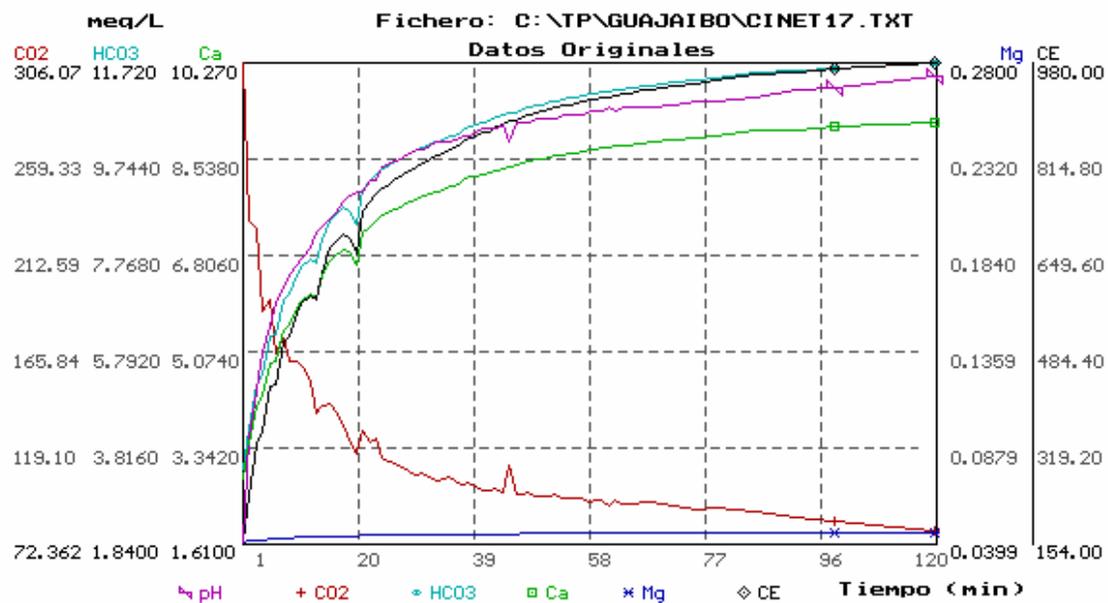
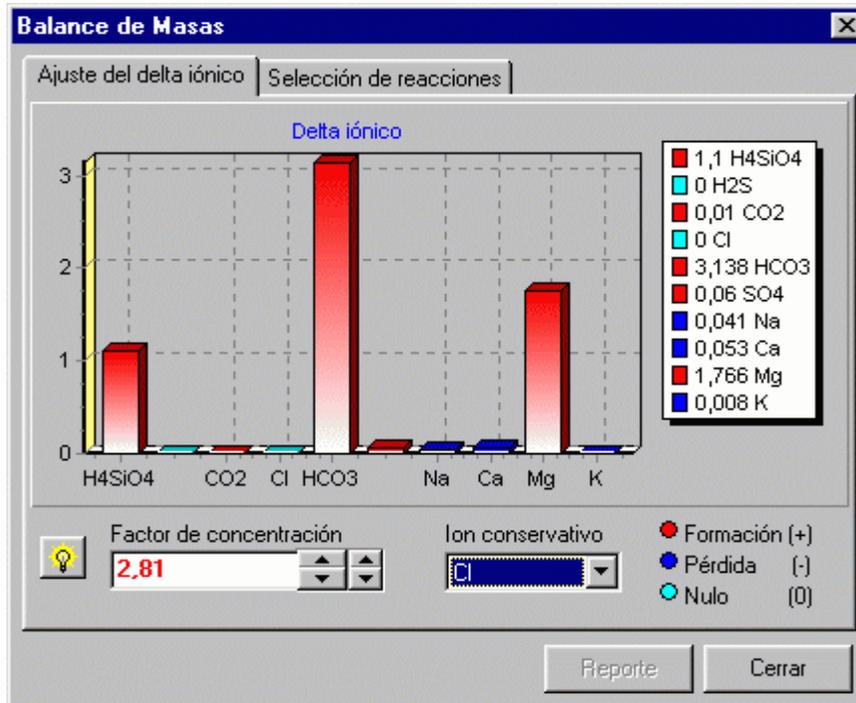


Figura 17. Evolución en el tiempo de las concentraciones de CO_2 , HCO_3^- , Ca^{2+} y Mg^{2+} , del pH y la conductividad eléctrica del fichero Cinet17.



Figura 18) Ventana principal del programa MODELAGUA.



**FIGURA 19) VENTANA DE AJUSTE DEL DELTA IÓNICO DEL PROGRAMA
MODELAGUA.**

BALANCE DE MASAS ENTRE EL POZO RANCHERITA Y EL AGUA DE LLUVIA.

Tabla 1. Balance de masas y procesos geoquímicos producidos por extracción de las lluvias en el pozo Rancherita a los 20m.

DATOS:	CO ₂	Cl	HCO ₃ ⁻	SO ₄	Na	Ca	Mg	K	.
Rancherita	0,90	1,10	5,50	0,13	0,46	3,05	0,15	0,01	
Lluvia	0,12	0,24	0,28	0,00	0,10	0,18	0,03	0,00	
Factor de concentración:	4,583								
DELTA IONICO:	0,78	0,00	4,22	0,13	0,00	2,23	0,01	0,01	
PROCESOS:									
Calcita (Disolución)	-2,23	0,00	4,46	0,00	0,00	2,23	0,00	0,00	
Pirita - Hemetita	0,25	0,00	-0,25	0,13	0,00	0,00	0,00	0,00	
CO2 (biogénico)	2,76	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
TOTAL:	0,78	0,00	4,21	0,13	0,00	2,23	0,00	0,00	
ERROR:	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,01	

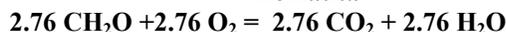


Calcita



Pirita

Hematita



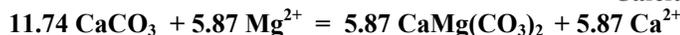
Análisis de mezcla del pozo Alvaro Barba a 23 m de profundidad.

Tabla 2. Análisis de mezcla del pozo Alvaro Barba a 23m de profundidad.

DATOS:	CO ₂	Cl	HCO ₃ ⁻	SO ₄	Na	Ca	Mg	K	.
Alvaro Barba (23m)	0,30	327,50	0,50	2,50	208,84	33,75	25,10	6,46	
Lluvia	0,12	0,24	0,28	0,00	0,10	0,18	0,03	0,00	
Agua Mar	0,00	550,00	2,40	22,50	457,26	11,00	52,00	14,14	
MEZCLA: 40,5% de agua dulce y 59,5% de agua de mar									
DELTA IONICO:	0,25	0,00	-1,04	-10,89	-63,40	27,13	-5,87	-1,96	
PROCESOS:									
Calcita (Precipitación)	11,42	0,00	-22,83	0,00	0,00	-11,42	0,00	0,00	
Calcita - Dolomita	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	5,87	-5,87	0,00	
Hemetita - Pirita	-21,79	0,00	21,79	-10,89	0,00	0,00	0,00	0,00	
Na-Ca Intercambio	0,00	0,00	0,00	0,00	-63,40	31,70	0,00	0,00	
K-Ca Intercambio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,98	0,00	-1,96	
CO2 (biogénico)	10,62	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	
TOTAL:	0,25	0,00	-1,04	-10,89	-63,40	27,13	-5,87	-1,96	
ERROR:	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	



Calcita



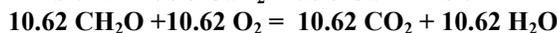
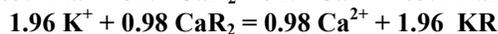
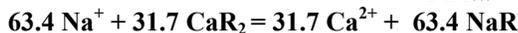
Calcita

Dolomita



Hematita

Pirita



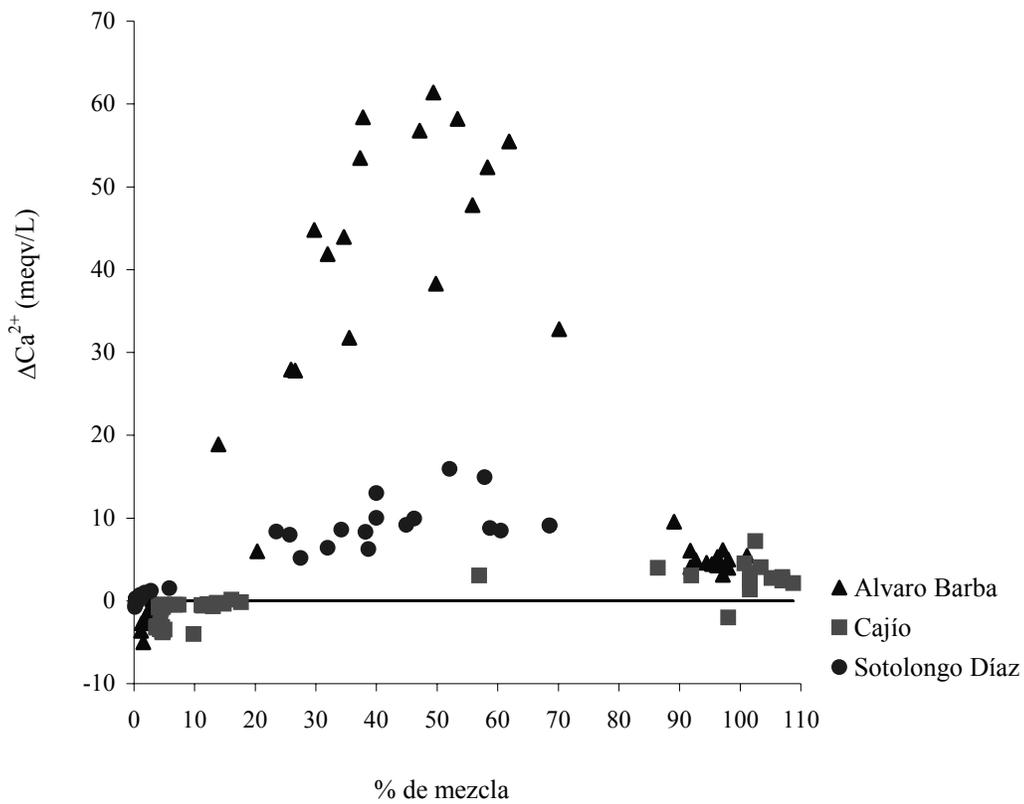
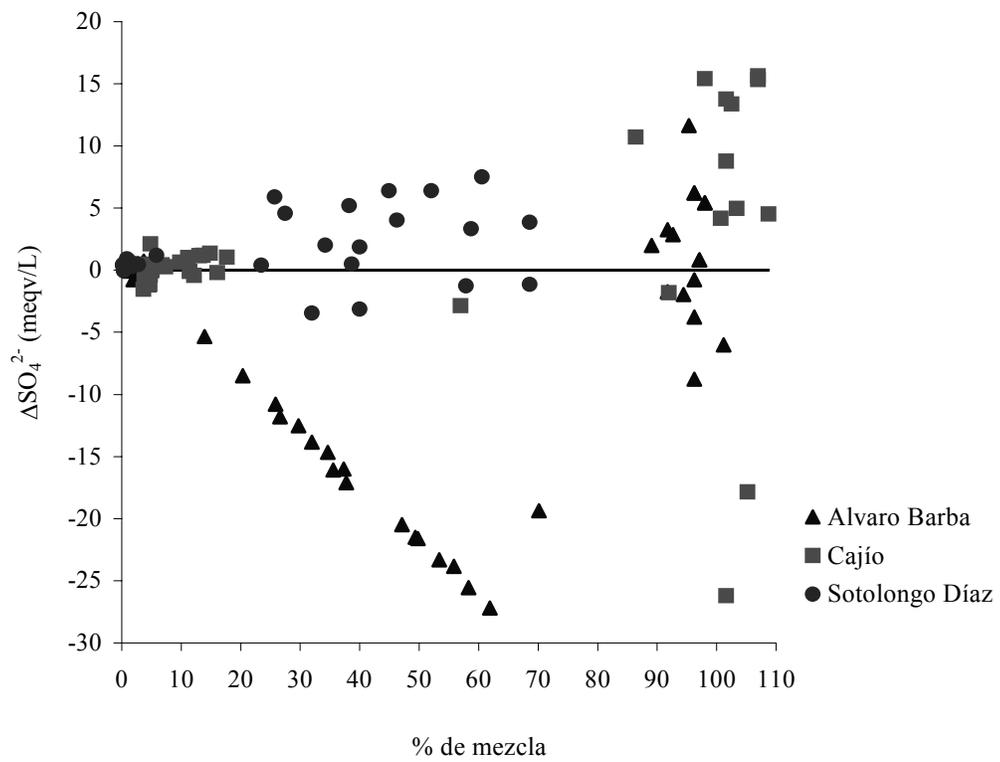


Figura 20. Representación de la variación de los plus o déficit (Δ iónicos) de los iones SO_4^{2-} y Ca^{2+} con el porcentaje de agua de mar en la mezcla agua dulce – agua de mar en el sector hidrogeológico Güira – Quivicán.

