

CONTROL DE LA COMPOSICION QUIMICA DE LAS AGUAS DE ABASTO Y MINERALES MEDIANTE MEDICIONES DE TEMPERATURA, pH Y CONDUCTIVIDAD.

J.R. Fagundo¹, E. Alvarez¹, I. Vinardell¹, J. Vega¹, J. Castillo²

1- Centro Nacional de Investigaciones Científicas del MES

2- Centro Nacional del Fondo Geológico del MINBAS

RESUMEN

Las aguas utilizadas para el abasto a la población, la agricultura y la industria; así como en la elaboración de cervezas y aguas minerales son objeto de análisis sistemáticos con vistas a controlar su calidad química. Por esa razón, en los organismos y empresas encargados de este control, se dispone de un gran volumen de datos hidroquímicos históricos, que procesados adecuadamente mediante programas de correlación matemática, brindan la oportunidad de obtener modelos que permiten la ulterior estimación de un gran número de indicadores de calidad de las aguas a partir de simples mediciones de temperatura, pH y conductividad. Esto crea las bases para un control automatizado y la racionalización de análisis químicos en acueductos, plantas de aguas minerales, cervecerías, sistemas de regadío y otros.

En este trabajo se muestran los resultados de la composición química y algunos indicadores de calidad, obtenidos mediante modelos de correlación matemática, en fuentes de diferente naturaleza y uso, haciendo énfasis en las aguas minerales y mineromedicinales. Dichos resultados no difieren significativamente de los obtenidos por análisis químico.

Los datos hidroquímicos fueron procesados por sistemas de programas específicos (SAPHIQ, SAMA, GEOQUIM y BATOMET), implementados para los objetivos del trabajo. Las mediciones de temperatura, pH, conductividad y potencial redox se realizaron con equipos electrónicos (prototipos) construidos en el CNIC: una versión para hacer las mediciones en el campo y otra en el laboratorio, según los objetivos del control. Con la ayuda de una sonda de 100 m se pueden hacer mediciones de conductividad en el perfil del pozo y determinar el nivel del agua subterránea.

En forma indirecta, a través de los softwares, se obtuvieron los valores de: composición química (HCO_3^- , Cl^- , SO_4^{2-} , Ca^{2+} , Mg^{2+} y $\text{Na}^+\text{+K}^+$), sólidos solubles totales, mineralización, dureza, contenido de CO_2 , agresividad de las aguas respecto a los minerales calcita (RSC), dolomita (RSD) y yeso (RSY).

FUNDAMENTO TEORICO

Las aguas naturales adquieren su composición química mediante un complejo proceso de interacciones químico-físicas, donde intervienen además factores de tipo hidrogeológicos, climáticos, microbiológicos y ambientales. Debido a que en un mismo sitio o

área con cierta homogeneidad desde el punto de vista hidrogeológico, muchos de estos factores se hacen constantes, es posible encontrar relaciones matemáticas simples entre la composición química de cada macrocomponente iónico y la conductividad eléctrica (Fagundo, 1990).

El modelo matemático más sencillo y justificable físicamente, mediante el cual se pueden ajustar los datos de concentración iónica vs conductividad eléctrica (CE) de un agua, es el de la línea recta que pasa por el origen de coordenadas.

Tal como indica Miller y Cols. (1988), la conductividad eléctrica teórica (CE_t) puede ser expresada en función de la concentración iónica (C_i) y la conductividad específica equivalente a dilución infinita (S_i) mediante la expresión: $CE_t = S \sum_{i=1}^n a_i (C_i S_i)^f$, donde: a_i es la fracción de iones libres presentes, cuyo valor tiende a 1 cuando la mineralización del agua es pequeña, y f es un factor exponencial que depende de la concentración y del tipo de agua. Si la conductividad y la concentración varían en un intervalo discreto, los valores de C_i y CE_t tienden a ajustar significativamente mediante el modelo de la línea recta con intercepto cero, en forma similar a lo que ocurre en el medio natural, cuando el proceso de adquisición de la composición química del agua es controlado por un solo factor.

Sin embargo, este comportamiento no se cumple cuando más de un factor es determinante en el mecanismo de ganancia iónica del agua, por ejemplo, cuando influyen los fenómenos de mezcla, como ocurre en las regiones cársicas litorales, donde las aguas adquieren su composición a partir de los aportes procedentes del acuífero y del mar. En este caso, el modelo de mejor ajuste puede ser un polinomio de segundo grado (Fagundo y Morera, 1991; Fagundo y Rodríguez, 1991) o una línea recta con intercepto diferente de cero (Gutiérrez et al, 1974), especialmente si los datos son procesados por patrones (intervalos) de composición definida (Santiago, 1988).

Por razones de espacio, en este trabajo se muestran, fundamentalmente, los resultados correspondientes a las aguas minerales del pozo La Paila.

MATERIALES Y METODOS

En este trabajo se tomaron como variables dependientes las concentraciones iónicas (expresadas en meq/l): HCO_3^- , Cl^- , SO_4^{2-} ; Ca^{2+} , Mg^{2+} y $Na^+ + K^+$. Como variable dependiente se tomó la conductividad eléctrica (en $\mu S/cm$). El muestreo fue realizado alternativamente en períodos seco y húmedo durante varios años, de modo que las fluctuaciones de las variables reflejaran el efecto del ciclo hidrológico.

Los datos fueron procesados mediante los sistemas de programas específicos: SAPHIQ, SAMA, GEOQUIM y BATOMET (Alvarez, Vinardell, et al., 1990, Fagundo et al, 1992).

Los modelos matemáticos empleados fueron los siguientes:

Mod. 1: $y = b_1X$ Ecuación de una línea recta con intercepto cero donde,
 $b_1 = (\sum_{i=1}^n C_i / CE) / N$

Mod. 2: $y = b_1X$ Ecuación de una línea recta con intercepto cero, donde b_1 se calcula por mínimos cuadrados

Mod. 3: $y = b_0 + b_1X$ Ecuación de una línea recta con intercepto diferente de cero

Mod. 4: $y = b_1X + b_2X^2$ Ecuación polinómica de segundo grado que pasa por el origen de coordenadas (parábola)

Mod. 5: $y = b_1X + b_2X^2 + b_3X^3 + b_4X^4 + b_5X^5$
Ecuación polinómica de quinto grado que pasa por el origen de coordenadas

La validación de los modelos se realizó con datos hidroquímicos no incluidos en aquellos ficheros que se utilizaron para la modelación.

AGUAS MINERALES

Las aguas que proceden de drenajes profundos, ascienden a la superficie en forma artificial o cuando existen fallas o discontinuidades tectónicas, estratificación o eventos geomorfológicos favorables. Se caracterizan por presentar elevada mineralización, despreciable fluctuación estacional y encontrarse saturadas o ligeramente saturadas.

Los ejemplos que se presentan corresponden a dos pozos (La Paila y P 27A) perforados en el macizo ofiolítico que aflora en el poblado de Madruga, provincia de La Habana. Sus aguas son de tipo $\text{HCO}_3^- > \text{SO}_4^{2-} - \text{Mg}^{2+} > \text{Ca}^{2+} > \text{Na}^+$ y $\text{HCO}_3^- - \text{Mg}^{2+}$, respectivamente; el manantial Gallina, en San Diego de los Baños, de aguas $\text{SO}_4^{2-} - \text{Ca}^{2+}$; el pozo P1 en Ciego Montero, de aguas $\text{HCO}_3^- > \text{Cl}^- - \text{Na}^+ > \text{Ca}^{2+}$ y un pozo de abasto en Sancti Spíritus (B-5), tomado de referencia, cuyas aguas poseen una composición química que varía de acuerdo a la época del año y el régimen de explotación.

Las aguas del pozo La Paila posee una conductividad eléctrica media relativamente alta, con muy poca variación (CV = 2,64 %). En relación a su correlación con la conductividad, al igual que en el caso anterior, los puntos tienden a presentarse como un conglomerado alrededor de un valor medio. Para la determinación de los modelos matemáticos, se utilizaron datos hidroquímicos tomados en condiciones estáticas, así como de bombeo del pozo, durante los trabajos de prospección llevados a cabo en el período 1988-1990. Para la validación de los modelos

se utilizaron datos del mismo período no incluidos en el fichero original.

En la tabla 1 se muestran los resultados de la validación de los modelos estudiados ajustados con los datos hidroquímicos del pozo La Paila. Como puede apreciarse, en este caso, los valores medios más altos del índice de similitud (IS_m) corresponden a los modelos de la línea recta que pasa por el origen de coordenadas, (Mod. 1 y Mod. 2). Sin embargo, las diferencias entre los resultados obtenidos por los diferentes modelos no difieren entre sí en forma significativa. Un comportamiento similar presentan los residuos entre los valores analíticos y los obtenidos por los diferentes modelos.

Tabla 1. Resultados comparativos de la validación de diferentes modelos de correlación matemática con datos del pozo La Paila.

Muestra	CE	Variable	Real	Mod 1	Mod 2	Mod 3	Mod 4	Mod 5
1	1261	HCO_3^-	7,95	7,86	7,86	7,85	7,78	7,82
		Cl^-	2,08	2,35	2,35	2,35	2,31	2,34
		SO_4^{2-}	2,35	2,33	2,33	2,32	2,31	2,31
		Ca^{2+}	3,48	3,38	3,37	3,36	3,37	3,34
		Mg^{2+}	6,38	6,68	6,67	6,67	6,57	6,62
		$Na^+ + K^+$	2,52	2,49	2,50	2,51	2,51	2,49
		TSS	877	880	880	879	872	874
		IS		0,969	0,969	0,969	0,971	0,968
2	2236	HCO_3^-	7,95	7,86	7,86	7,85	7,78	7,66
		Cl^-	2,08	2,31	2,31	2,32	2,24	2,31
		SO_4^{2-}	2,34	2,28	2,28	2,33	2,31	2,32
		Ca^{2+}	3,30	3,31	3,30	3,39	3,41	3,37
		Mg^{2+}	6,37	6,54	6,54	6,59	6,52	6,56
		$Na^+ + K^+$	2,60	2,44	2,45	2,36	2,38	2,35
		TSS	860	862	862	863	855	861
		IS		0,970	0,970	0,963	0,963	0,963
3	1229	HCO_3^-	7,90	7,66	7,66	7,64	7,55	7,63
		Cl^-	2,03	2,29	2,29	2,31	2,22	2,30
		SO_4^{2-}	2,27	2,27	2,27	2,33	2,31	2,32
		Ca^{2+}	3,30	3,29	3,28	3,39	3,42	3,38
		Mg^{2+}	6,68	6,51	6,50	6,57	6,51	6,54
		$Na^+ + K^+$	2,22	2,43	2,43	2,32	2,34	2,31
		TSS	861	857	857	860	850	857
		IS		0,934	0,933	0,934	0,939	0,965
4	1196	HCO_3^-	7,50	7,45	7,46	7,41	7,30	7,49
		Cl^-	2,80	2,23	2,23	2,26	2,14	2,28
		SO_4^{2-}	2,42	2,21	2,21	2,34	2,30	2,34
		Ca^{2+}	3,40	3,20	3,19	3,43	3,47	3,44
		Mg^{2+}	6,04	6,33	6,33	6,46	6,44	6,51
		$Na^+ + K^+$	3,28	2,36	2,37	2,13	2,16	2,15
		TSS	890	834	834	840	828	846
		IS		0,914	0,913	0,910	0,900	0,913

5	1004	HCO ₃ ⁻	7,61	6,88	6,88	6,78	6,64	7,36
		Cl	1,98	2,06	2,06	2,15	1,90	2,27
		SO ₄ ²⁻	2,25	2,04	2,04	2,35	2,28	2,47
		Ca ²⁺	3,00	2,95	2,95	3,53	3,57	3,68
		Mg ²⁺	6,00	5,85	5,84	6,17	6,22	6,61
		Na ⁺ +K ⁺	2,84	2,18	2,14	1,59	1,70	1,79
		TSS	891	870	770	784	767	842
		IS		0,921	0,921	0,876	0,877	0,879

		IS _m		0,948	0,947	0,936	0,934	0,937

CONCLUSIONES

Mediante el procesamiento estadístico de datos hidroquímicos históricos, correspondientes a muestreos realizados sistemáticamente en distintos medios geológicos y condiciones de circulación hídrica, y por ende, representativos de diferentes modos de adquisición de la composición química, se llegó a las conclusiones que a continuación se señalan:

En todos los casos estudiados se puede controlar la composición química y otros indicadores de calidad de las aguas mediante mediciones "in situ" de temperatura, pH y conductividad, y el empleo de algunos sistemas de programas de computación específicos tales como SAPHIQ, GEOQUIM, SAMA Y BATOMET.

Este es un método de control muy sencillo, pues una vez creado el fichero de datos se puede, de forma muy operativa (mediciones de conductividad, pH y temperatura), controlar la calidad del agua, pudiéndose detectar incluso, posible sobreexplotación en el acuífero; así como presencia de otras fuentes de alimentación al mismo.

Las aguas minerales presentan menor variación en su composición química, incluso que las que se mueven subterráneamente por horizontes acuíferos más someros. Presentan, por lo general, un solo patrón hidrogeoquímico. Las variables hidroquímicas pueden tender a una distribución normal si el número de datos disponibles es suficiente, y a agruparse como un conglomerado de puntos en relación a la conductividad eléctrica. Los datos ajustan mejor mediante el modelo de la línea recta que pasa por el origen de coordenadas.

Las aguas superficiales (naturales) se caracterizan por presentar gran variación en su composición química, tendiendo a encontrarse sobresaturadas en los períodos secos e insaturadas en los períodos lluviosos. La variación de las variables tiende a ser polimodal cuando no existe una uniformidad entre los datos representativos de las diferentes condiciones hidroclimáticas (seca y lluvia), o cuando el número de datos es relativamente pequeño. Las variables que reflejan la composición química de las aguas tienden a ajustar significativamente y mejor mediante el modelo de la línea recta que pasa por el origen de coordenadas,

cuando no existen mezclas de aguas y las mismas presentan un solo patrón hidrogeoquímico, debido a que en el proceso de interacción agua-roca existe un factor dominante, por ejemplo la litología, en el modo de adquisición de la composición química.

En las aguas subterráneas (naturales) como las de los acuíferos cársicos, la variación estacional de las variables hidroquímicas es más pequeña, debido al menor efecto de las lluvias en la composición química. Pueden encontrarse insaturadas o saturadas una parte del año y poseer un patrón hidrogeoquímico fundamental si el pozo interesa un solo horizonte acuífero. Si intersepta más de un horizonte puede entonces reflejar más de un patrón en dependencia de la geología local. Las variables tienen mayor tendencia a la distribución normal, y en relación a la conductividad eléctrica, presentan poca linealidad, ya que los datos tienden a agruparse como un conglomerado a partir de un valor medio. Debido a esta situación, las correlaciones matemáticas no son tan buenas como en el caso de las aguas superficiales, al menos para algunas de las variables. No obstante, se pueden hacer relativamente buenas estimaciones de la composición química utilizando modelos lineales (con intercepto cero o diferente de cero) o polinomios de segundo grado.

Las aguas superficiales (naturales) donde priman mezclas de aguas dulce y salinas, presentan una gran variabilidad en su composición química. La distribución de los datos hidroquímicos puede ser de tipo normal o polimodal, en dependencia de que sean uniformes o no el número de datos representativos de los diferentes tipos de aguas (patrones hidrogeoquímicos) que participan en la mezcla. Si estas facies o patrones hidroquímicos son de un número discreto, los datos tienden a ajustar bien mediante polinomios de segundo grado (con intercepto cero) o mediante el modelo de la línea recta con intercepto diferente de cero. En estos casos, el modelo de la línea recta que pasa por el origen de coordenadas sólo da buenos resultados si previamente los datos son separados mediante un método de reconocimiento de patrones.

En forma similar a las aguas superficiales salinizadas se comportan las aguas subterráneas de los acuíferos cársicos afectados por la intrusión marina. La composición química refleja una gran variación en dependencia del régimen de lluvia y de alimentación y explotación del acuífero. Cuando la variación de los patrones hidrogeoquímicos es discreto, como sucede en los casos en que participan de la mezcla entre dos y tres patrones diferentes (por ejemplo, aguas que varían de $\text{HCO}_3^- > \text{Cl}^- - \text{Ca}^{2+} > \text{Na}^+$ a $\text{Cl}^- > \text{HCO}_3^- - \text{Na}^+ > \text{Ca}^{2+}$), se logran buenas estimaciones de la composición química a partir de mediciones de conductividad, mediante el modelo del polinomio de segundo grado que pasa por el origen de coordenadas o mediante el modelo de la línea recta con intercepto diferente de cero. En los casos extremos, donde la variación de la composición involucra un gran número de patrones (por ejemplo de $\text{HCO}_3^- - \text{Ca}^{2+}$ ó $\text{HCO}_3^- > \text{Cl}^- - \text{Ca}^{2+} > \text{Na}^+$ a $\text{Cl}^- - \text{Na}^+$), como sucede en los pozos muestreados por batometría a diferentes profundidades, las predicciones de la composición

química son mejores, si previamente los datos son separados por reconocimiento de patrones y luego los ficheros de datos correspondientes a cada patrón, son procesados mediante el modelo de la línea recta que pasa por el origen de coordenadas.

BIBLIOGRAFIA

Alvarez E., Vinardell I., Fagundo J.R., Reguera E. y Cardoso M.E. (1990). Evolución química y relaciones empíricas en aguas naturales. II- Sistema Automatizado para el Monitoreo de las Aguas. *Voluntad Hidráulica*, 83: 15-25.

Alvarez E., Vinardell I., Fagundo J.R., Vega J. y Reguera E. (1990). Sistema automatizado de tratamiento de datos hidroquímicos para el chequeo de la calidad de las aguas. *Estudios Geológicos (Madrid)*, 45 (5-6): 409-414.

Fagundo J.R. (1990). Evolución química y relaciones empíricas en aguas naturales. Efecto de los factores geológicos, hidrogeológicos y ambientales. *Hidrogeología (Granada)*, 5: 33-46.

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

Fagundo J.R. y Morera W. (1988). Modelos matemáticos para el control de la composición química de las aguas del Plan Citrícola Victoria de Girón, Bolondrón, Matanzas, mediante mediciones de conductividad eléctrica. Informe científico-Técnico, C. Habana, 62 pp.

Fagundo J.R. y Rodríguez J.E. (1991). Hydrochemical patterns and mathematical correlations in karst at the examples of Cuba. Proc. of the Intern. Conference on Environmental Changes in Karst Areas. Univ. Padova (Italy): 36-369.

Gutiérrez J., García J.M. y Beato O. (1974). Algunas experiencias obtenidas en el estudio de la calidad de las aguas subterráneas empleando hidromuestreadores verticales. *Voluntad Hidráulica*, Vo. XVIII: 43-55.

Miller R.L., Brodfard W.L. and Peters N.E. (1988). Specific Conductance: Theoretical Considerations and Application to Analytical Quality Control. US. Geological Survey Water-supply paper: 2311, 16 pp.

Santiago J.F. (1990). Caracterización de la composición química de las aguas subterráneas cársicas de las provincias Habana y Ciudad Habana. Tesis Dr. Ciencias Técnicas, C. Habana 1990, 144 pp.