

Análisis de contribución de fuentes de contaminación en aguas subterráneas y superficiales utilizando el Modelo de Mezcla Bayesiano

Jürgen Mahlknecht

Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey
Ave. Eugenio Garza Sada 2501, C.P. 64849 Monterrey, Nuevo León
jurgen@tec.mx

Resumen

La buena calidad del agua es esencial para sus diferentes usos y para los ecosistemas. Actualmente, al menos la mitad de la población mundial sufre de agua contaminada y con una tendencia creciente. La contaminación de fuente difusa sigue siendo el reto por ser mal reportada y poco regulada. Una de las estrategias para controlar la contaminación difusa es realizar un plan de gestión del agua a nivel cuenca. Para esto se requiere conocer el origen y la contribución de las fuentes contaminantes en los cuerpos receptores de agua. Para este fin se han utilizado trazadores ambientales según la fuente. Inevitablemente, estas técnicas exhiben diversas incertidumbres derivadas de errores de medición, variabilidad espaciotemporal de fuentes, transformación bioquímica y mezcla dinámica. Para reflejar las incertidumbres involucradas en la contribución de fuentes, se ha adoptado un enfoque estadístico, el Modelo de Mezcla Bayesiano. Los estudios actuales de este modelo se han limitado principalmente a comprender la diversidad espaciotemporal de la contaminación del agua. El curso del trabajo futuro debería centrarse en mejorar la precisión de los diseños actuales de análisis de contribución de fuentes y la cooperación y acuerdos entre actores involucrados a nivel cuenca.

Palabras Claves: calidad del agua, contaminación difusa, mezcla de fuentes, contribución de fuentes, trazadores ambientales, modelo Bayesiano.

1. Introducción

La buena calidad del agua es esencial para el bienestar humano, para su uso en agricultura, acuicultura e industria, así como fortalecer los ecosistemas y los servicios que brindan. Mejorar la calidad del agua es un elemento crítico de los Objetivos de Desarrollo Sostenible 2030. Cumple un papel fundamental en la reducción de la pobreza y enfermedades, y en la promoción del crecimiento sostenible. Sin embargo, existen grandes rezagos de calidad de agua en todas las regiones del mundo.

Al menos la mitad de la población mundial sufre de agua contaminada; y existe una tendencia a empeorar. El crecimiento de la población y el cambio climático ejercen una presión cada vez mayor sobre la capacidad de los cuerpos de agua (es decir ríos, lagos y acuíferos) para procesar

aguas residuales, nutrientes y contaminantes antes de que pierdan su función de soporte vital. Se proyecta un aumento de la contaminación del agua en todas las regiones del mundo, que tendría un impacto más fuerte en los países de ingresos medios-altos y medios-bajos. A su vez, aumentan los riesgos para la salud humana, el desarrollo económico y los ecosistemas (OCDE, 2017).

En México, en el año 2020, el 64.7% de los 3,493 sitios monitoreados de agua superficial de la Red Nacional de Medición de Calidad de Agua presenta incumplimiento en uno o varios de los parámetros medidos. Con el agua subterránea de la Red se tiene una situación similar: de los 1,068 sitios monitoreados, el 59.4% no cumple en uno o varios de los parámetros medidos (CONAGUA, 2021).

Los contaminantes del agua se caracterizan comúnmente como puntuales o difusos, según su fuente y camino hacia el medio receptor (ríos, lagos, acuíferos). Las fuentes puntuales de contaminación se descargan directamente a los cuerpos receptores de agua en lugares discretos, como tuberías y zanjas de alcantarillado que vienen de una planta de tratamiento de agua residual, municipal o industrial. Las fuentes difusas de contaminación se descargan indirectamente a los cuerpos receptores de agua, a través del flujo superficial y subterráneo y deposición atmosférica a aguas superficiales y la lixiviación a través del suelo a aguas subterráneas. Ejemplos donde se da la contaminación difusa, son la aplicación de fertilizantes, uso de pesticidas y las fugas en el sistema de alcantarillado.

Las fuentes puntuales de contaminación se pueden controlar, porque son más fáciles de identificar y más rentables de cuantificar, gestionar y regular. En comparación, la contaminación de fuente difusa y su impacto en la salud humana y de los ecosistemas sigue siendo en gran parte mal reportada y poco regulada. Esto se debe a que es difícil de monitorear y regular debido a su alta variabilidad, espacial y temporal, lo que hace que la atribución de fuentes de contaminación sea compleja.

Un caso común de contaminación difusa en agua superficial y subterránea en el mundo y en México es la contaminación por nitratos (NO_3), cuyo origen es muy diverso, principalmente fertilizantes, sistemas sépticos y alcantarillado, operaciones o almacenamiento de estiércol, deposición atmosférica de gas de óxido de nitrógeno (NO_x), principalmente del tráfico e industria y amoníaco proveniente de la agricultura (de Vries, 2021).

Los nitratos amenazan los ecosistemas acuáticos y la salud humana. A menudo nos encontramos con la situación de que el nitrato que contamina un cuerpo receptor de agua se deriva de una mezcla de fuentes, pero es imposible identificar su

origen y la contribución de cada fuente mediante un análisis químico convencional. Por otro lado, es importante comprender la contaminación difusa, ya que es clave para desarrollar un plan de gestión apropiado para la protección de los recursos hídricos.

A nivel técnico, se han adoptado trazadores ambientales para resolver los problemas de mezcla de fuentes y comprender el origen de la contaminación del agua. El método clásico es el modelo de mezcla dual de isótopos estables, que puede resolverse de manera sencilla (Aravena et al., 1993; Mayer et al., 2002; Pasten-Zapata et al., 2014). Desafortunadamente, el cálculo determinista convencional no puede reflejar las diversas incertidumbres involucradas en el modelo de mezcla, lo que podría dar lugar a un error en la evaluación cuantitativa (Ji et al., 2017).

La distribución de fuentes de contaminación estudiada mediante la construcción de un modelo de mezcla de este tipo incluye inevitablemente varios errores, considerando a: (i) una superposición significativa en las distribuciones entre varias fuentes de contaminantes; (ii) una variabilidad espacial y temporal en cada fuente del contaminante; (iii) la aparición de procesos complejos de fraccionamiento bioquímico; y (iv) demasiadas fuentes en comparación con el número de trazadores (Meghdadi y Javar, 2018; Torres-Martínez et al., 2020; Ju et al., 2022). Esto puede causar incertidumbre en el modelo de mezcla de fuentes.

El Modelo de Mezcla Bayesiano puede ser útil en resolver esta situación, ya que puede producir la distribución de probabilidad de la contribución proporcional de cada fuente en función de las incertidumbres de los parámetros de entrada. Con eso supera las limitaciones del modelo de mezcla lineal de fuentes (Parnell et al., 2008) (Figura 1). Es más preciso y demuestra ser útil para identificar no solo las contribuciones de la fuente dominante, sino también de otras fuentes potenciales (Xue et al., 2012).

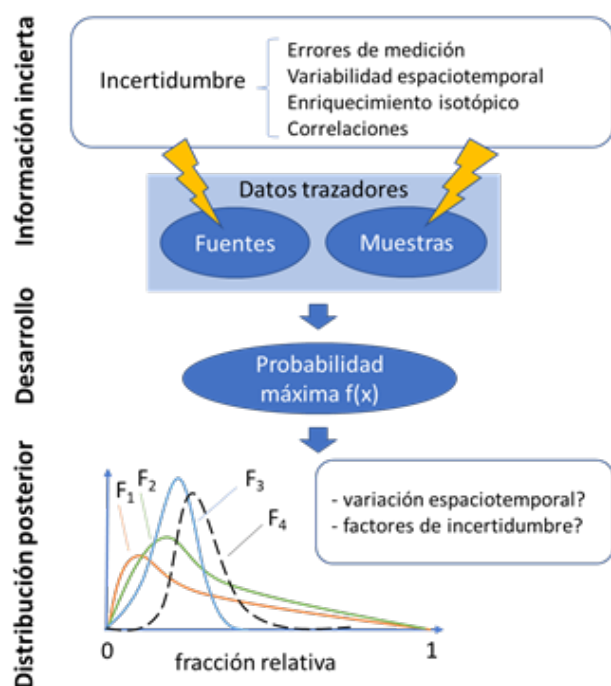


Figura 1. Esquema del Modelo de Mezcla Bayesiano. Tomado y modificado de Parnell et al. (2008) y Ju et al. (2022).

2. Modelo de Mezcla Bayesiano

Los modelos estadísticos Bayesianos estiman los intervalos de confianza para la distribución de fuentes considerando la incertidumbre derivada de la entrada (Moore y Semmens, 2008) (Figura 1). En los problemas computacionales de mezcla de fuentes, el enfoque Bayesiano suele ir acompañado del método de cadenas de Markov de Monte Carlo:

$$X_{ij} = \sum_{k=1}^k P_k (S_{jk} + c_{jk}) + \varepsilon_{ij} \quad (1)$$

$$S_{jk} \sim N(\mu_{jk}, \omega_{jk}^2) \quad (2)$$

$$c_{jk} \sim N(\lambda_{jk}, \tau_{jk}^2) \quad (3)$$

$$\varepsilon_{jk} \sim N(0, \sigma_j^2) \quad (4)$$

En donde X_{ij} es el valor del isótopo j de la muestra i ($i = 1, 2, 3, \dots, N$ y $j = 1, 2, 3, \dots, N$); P_k es la proporción de la fuente k ($k = 1, 2, 3, \dots, N$) siguiendo la distribución de Dirichlet, que es estimada por el modelo de mezcla; S_{jk} es el valor de fuente k del isótopo j , que se distribuye normal con una media de μ_{jk} y una desviación estándar (σ_{jk}) de ω_{jk}^2 que refleja la incertidumbre espacio-temporal de las fuentes; c_{jk} es el factor de enriquecimiento del isótopo j en la fuente k , que normalmente se distribuye con una media de λ_{jk} y σ_{jk} de τ_{jk}^2 ; y ε_{jk} es el error residual para la variación no cuantificada entre mezclas individuales, que normalmente se distribuye con una media de cero y σ_{jk} de σ_j^2 .

2.1 Programas computacionales

Existen diferentes programas computacionales para ejecutar el Modelo de Mezcla Bayesiano. El llamado Análisis de Isótopos Estables en R (SIAR, por sus siglas en inglés) resuelve las ecuaciones arriba mencionadas de manera simultánea, bajo un código abierto (software R) y proporciona una estimación precisa de la contribución de cada fuente de contaminación (Parnell et al., 2010). MixSIAR (<https://cran.rproject.org/web/packages/siar/index.html>) es una versión más reciente que se desarrolló para permitir condiciones específicas de la situación dentro de un sistema de mezcla de datos y fuentes. Este código tiene una capacidad ampliada en términos de incorporar datos covariables para explicar la variabilidad en las proporciones de la mezcla a través de efectos fijos y aleatorios (Stock et al., 2018).

2.2 Análisis de incertidumbre

Una de las ventajas clave del Modelo de Mezcla Bayesiano frente a los métodos convencionales es que permite a los usuarios evaluar las incertidumbres involucradas en el problema de distribución de fuentes. En muchos casos, la media y la desviación estándar de las fuentes de contaminación se han obtenido de la literatura

basándose en valores estadísticos de muchos sitios. El uso de valores de la literatura genera una desviación estándar alta, lo cual resulta en rangos muy amplios de distribuciones posteriores e implica una mayor incertidumbre en la contribución de cada fuente (Xing et al., 2016). Esta situación podría mejorarse utilizando el material de fuentes del sitio original y adoptando casos específicos que compartan fertilizantes, emisiones de fuentes en condiciones climáticas y topográficas similares (Zhang et al., 2018).

Otro punto para considerar es que los contaminantes pueden ser alterados a través de procesos de transformación bioquímica. Por ejemplo, la volatilización, la nitrificación y la desnitrificación pueden contribuir a los principales procesos de fraccionamiento de los contaminantes de nitratos (Kendall et al., 1998), lo que puede sesgar y agregar incertidumbre a la distribución de la fuente de contaminación. Para una distribución precisa de la fuente, el fraccionamiento isotópico debe reflejarse en el modelo de mezcla de la fuente, con un factor de enriquecimiento (en la Ecuación 1).

3. Retos de investigación y trabajo futuro

La mayoría de los estudios anteriores del Modelo de Mezcla Bayesiano se han centrado en la variación espaciotemporal de las contribuciones proporcionales de las fuentes contaminantes. Sin embargo, el objetivo final de la contribución de fuentes es estimar la fracción de mezcla entre las fuentes designadas con la menor incertidumbre (Figura 1). El marco Bayesiano tiene las fortalezas en términos de distribución de fuentes, ya que puede mejorar el nivel de confianza de la estimación al imponer restricciones adicionales a la estructura de mezcla de fuentes.

Este sofisticado modelo de mezcla refleja la realidad del sistema natural; sin embargo, probablemente aumenta la incertidumbre en la estimación con un sistema de mezcla mal especificado (N de estimaciones $>$ N de restricciones). La observación representativa

de este problema fue descubierta por Xue et al. (2009), quien mostró que una pequeña variación en la observación resultó en un gran cambio en la distribución de fuentes. Este fenómeno se atribuye generalmente a la falta de restricciones sobre las posibles distribuciones de fuentes, que podrían mejorarse mediante el muestreo repetido de muestras de fuentes y mezclas. Ding et al. (2014) también declararon que las muestras de agua adicionales podrían reducir la incertidumbre de la distribución de fuentes. Sin embargo, un muestreo de campo adicional requiere mucho tiempo, trabajo y recursos, lo que limita el estudio de distribución de fuentes mejorado.

La incorporación de parámetros geoquímicos convencionales y rentables en el Modelo de Mezcla Bayesiano puede mejorar el nivel de confianza de la distribución de fuentes. Esto introduce restricciones adicionales en el modelo de mezcla de fuentes, reduciendo así la incertidumbre de la distribución de fuentes. Por ejemplo, los haluros bromo, cloro y yodo son de naturaleza conservadora y se pueden utilizar para identificar posibles fuentes de contaminación en solutos (Pasten-Zapata et al., 2014). Las proporciones de ciertos otros isótopos pueden distinguir claramente la fuente de aguas residuales de nitrato de las fuentes derivadas del estiércol o deposición atmosférica (Torres-Martínez et al., 2021b; Torres-Martínez et al., 2021b). También la combinación del Modelo de Mezcla Bayesiano con indicadores microbiológicos puede potencialmente reducir la incertidumbre en la contribución de las fuentes.

En una mezcla de fuentes es probable que la contribución proporcional de cada fuente contaminante tenga una correlación con las actividades antropogénicas en la superficie. La información de covariables, como por ejemplo el uso y la cobertura del suelo, se pueden incorporar al modelo. Este proceso puede ayudar a reducir la incertidumbre en la contribución de fuentes.

Por último, para que sea exitoso un plan de gestión de la calidad del agua, además de la identificación y cuantificación de la contaminación difusa y sus fuentes, se requiere la evaluación de los riesgos ambientales, económicos y sociales, la definición de un nivel apropiado de control de contaminación y la determinación de las actividades prioritarias, todo ello basado en el conocimiento, la cooperación y los acuerdos entre los actores involucrados a nivel cuenca (OCDE, 2017).

4. Conclusiones

El Modelo de Mezcla Bayesiano representa un avance obvio frente a los modelos de mezcla lineal ya que puede producir la distribución de probabilidad de la contribución proporcional de cada fuente en función de las incertidumbres de los parámetros de entrada. Con esto el modelo obtenido es más preciso y demuestra ser útil para identificar no solo las contribuciones de la fuente dominante, sino también de otras fuentes potenciales. El beneficio clave del marco Bayesiano es que determina las incertidumbres relacionadas con la contribución de las fuentes. Para futuras investigaciones, se sugiere explorar más estrategias para ayudar a mejorar el Modelo de Mezcla Bayesiano en la evaluación de contribución de fuentes: (i) incorporando información externa (parámetros geoquímicos y microbiológicos adicionales) que está relacionada con la distribución natural del parámetro de entrada y; (ii) considerando información covariable, como por ejemplo el uso y la cobertura de suelo.

Agradecimientos

Se agradece a la Comisión Nacional del Agua (CONAGUA) y Servicio de Agua y Drenaje de Monterrey (SADM) por el apoyo recibido en la recolección de información y logística de campo durante los proyectos realizados relativos al tema

de este artículo. La cátedra de Economía Circular del Agua FEMSA del Tecnológico de Monterrey (ITESM) y el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) brindaron apoyos financieros para el gasto operativo, becas y estímulo del Sistema Nacional de Investigadores. Finalmente se agradece al revisor anónimo por sus valiosos comentarios, que ayudaron a mejorar el manuscrito.

Referencias

- Aravena, R., Evans, M. L., Cherry, J. A. (1993). Stable isotopes of oxygen and nitrogen in source identification of nitrate from septic systems. *Groundwater*, 31(2), 180-186. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6584.1993.tb01809.x>
- CONAGUA (2021) Red Nacional de Medición de Calidad del Agua. Comisión Nacional del Agua, Ciudad de México, México. <https://www.gob.mx/conagua/articulos/calidad-del-agua>
- de Vries, W. (2021). Impacts of nitrogen emissions on ecosystems and human health: A mini review. *Current Opinion in Environmental Science & Health*, 100249. <https://doi.org/10.1016/j.coesh.2021.100249>
- Ding, J., Xi, B., Gao, R., He, L., Liu, H., Dai, X., Yu, Y. (2014). Identifying diffused nitrate sources in a stream in an agricultural field using a dual isotopic approach. *Science of the total environment*, 484, 10-18. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2014.03.018>
- Ji, X., Xie, R., Hao, Y., Lu, J. (2017). Quantitative identification of nitrate pollution sources and uncertainty analysis based on dual isotope approach in an agricultural watershed. *Environmental Pollution*, 229, 586-594. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2017.06.100>

- Ju, Y., Mahlkecht, J., Lee, K. K., Kaown, D. (2022). Bayesian approach for simultaneous recognition of contaminant sources in groundwater and surface water resources. *Current Opinion in Environmental Science & Health*, 100321. <https://doi.org/10.1016/j.coesh.2021.100321>
- Kendall, C. (1998). Tracing sources and cycling of nitrate in catchments. *Isotope tracers in catchment hydrology*, 839. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-81546-0.50023-9>
- Mayer, B., Boyer, E. W., Goodale, C., Jaworski, N. A., Van Breemen, N., Howarth, R. W., Seitzinger, S., Billen, G., Lajtha, K., Nadelhoffer, K., Van Dam, D., Hetling, L.J., Nosal, M., Paustian, K. (2002). Sources of nitrate in rivers draining sixteen watersheds in the northeastern US: Isotopic constraints. *Biogeochemistry*, 57, 171-197. <https://doi.org/10.1023/A:1015744002496>
- Meghdadi, A., Javar, N. (2018). Quantification of spatial and seasonal variations in the proportional contribution of nitrate sources using a multi-isotope approach and Bayesian isotope mixing model. *Environmental pollution*, 235, 207-222. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2017.12.078>
- Moore, J. W., Semmens, B. X. (2008). Incorporating uncertainty and prior information into stable isotope mixing models. *Ecology letters*, 11(5), 470-480. <https://doi.org/10.1111/j.1461-0248.2008.01163.x>
- OCDE, (2017). Degraded Waters: Emerging Policy Solutions. Organización de Cooperación para el Desarrollo Económico. Paris, Francia. <https://www.oecd.org/environment/resources/Diffuse-Pollution-Degraded-Waters-Policy-Highlights.pdf>
- Parnell, A. C., Haslett, J., Allen, J. R., Buck, C. E., Huntley, B. (2008). A flexible approach to assessing synchronicity of past events using Bayesian reconstructions of sedimentation history. *Quaternary Science Reviews*, 27(19-20), 1872-1885. <https://doi.org/10.1016/j.quascirev.2008.07.009>
- Parnell, A. C., Inger, R., Bearhop, S., & Jackson, A. L. (2010). Source partitioning using stable isotopes: coping with too much variation. *PloS one*, 5(3), e9672. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0009672>
- Pastén-Zapata, E., Ledesma-Ruiz, R., Harter, T., Ramírez, A. I., Mahlkecht, J. (2014). Assessment of sources and fate of nitrate in shallow groundwater of an agricultural area by using a multi-tracer approach. *Science of the Total Environment*, 470, 855-864. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.10.043>
- Stock, B. C., Jackson, A. L., Ward, E. J., Parnell, A. C., Phillips, D. L., Semmens, B. X. (2018). Analyzing mixing systems using a new generation of Bayesian tracer mixing models. *PeerJ*, 6, e5096. <https://doi.org/10.7717/peerj.5096>
- Torres-Martínez, J. A., Mora, A., Knappett, P. S., Ornelas-Soto, N., Mahlkecht, J. (2020). Tracking nitrate and sulfate sources in groundwater of an urbanized valley using a multi-tracer approach combined with a Bayesian isotope mixing model. *Water Research*, 182, 115962. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2020.115962>

- Torres-Martínez, J. A., Mora, A., Mahlknecht, J., Daesslé, L. W., Cervantes-Avilés, P. A., Ledesma-Ruiz, R. (2021a). Estimation of nitrate pollution sources and transformations in groundwater of an intensive livestock-agricultural area (Comarca Lagunera), combining major ions, stable isotopes and MixSIAR model. *Environmental Pollution*, 269, 115445. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.115445>
- Torres-Martínez, J. A., Mora, A., Mahlknecht, J., Kaown, D., Barceló, D. (2021b). Determining nitrate and sulfate pollution sources and transformations in a coastal aquifer impacted by seawater intrusion—A multi-isotopic approach combined with self-organizing maps and a Bayesian mixing model. *Journal of Hazardous Materials*, 417, 126103. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.126103>
- Xing, M., Liu, W. (2016). Using dual isotopes to identify sources and transformations of nitrogen in water catchments with different land uses, Loess Plateau of China. *Environmental Science and Pollution Research*, 23(1), 388-401. <https://doi.org/10.1007/s11356-015-5268-y>
- Xue, D., Botte, J., De Baets, B., Accoe, F., Nestler, A., Taylor, P., Van Cleemput, O., Berglund, M., Boeckx, P. (2009). Present limitations and future prospects of stable isotope methods for nitrate source identification in surface-and groundwater. *Water Research*, 43(5), 1159-1170. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2008.12.048>
- Xue, D., De Baets, B., Van Cleemput, O., Hennessy, C., Berglund, M., Boeckx, P. (2012). Use of a Bayesian isotope mixing model to estimate proportional contributions of multiple nitrate sources in surface water. *Environmental Pollution*, 161, 43-49. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2011.09.033>
- Zhang, M., Zhi, Y., Shi, J., Wu, L. (2018). Apportionment and uncertainty analysis of nitrate sources based on the dual isotope approach and a Bayesian isotope mixing model at the watershed scale. *Science of the Total Environment*, 639, 1175-1187. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.05.239>
- Torres-Martínez, J. A., Mora, A., Mahlknecht, J., Daesslé, L. W., Cervantes-Avilés, P. A., & Ledesma-Ruiz, R. (2021a). Estimation of nitrate pollution sources and transformations in groundwater of an intensive livestock-agricultural area (Comarca Lagunera), combining major ions, stable isotopes and MixSIAR model. *Environmental Pollution*, 269, 115445. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2020.115445>

Manuscrito recibido: 8 de enero de 2022
 Recepción del manuscrito corregido: 21 de enero de 2022
 Manuscrito aceptado: 31 de enero de 2022