

Fingerprinting con CSSI- CSSI-FRX: Técnicas y Aplicaciones

Kimi AI

2025/01/01

CONTENTS

▶ 01 Introducción y Relevancia

▶ 02 Antecedentes Científicos

▶ 03 Trazadores CSSI y FRX

▶ 04 Diseño de Muestreo

▶ 05 Pretratamiento y Análisis

▶ 06 Modelos de Mezclas



CONTENTS

01

Soluciones y
Resultados

02

Conclusiones y
Prospectiva

03

Bibliografía y
Recursos





01

Introducción y Relevancia

Fingerprinting Ambiental

Identificación de fuentes de contaminación mediante trazadores químicos



CSSI

Isótopos Estables Específicos de Compuestos para rastrear orígenes de sedimentos y compuestos orgánicos.



FRX

Fluorescencia de Rayos X para la cuantificación de metales y elementos traza en suelos y sedimentos.



Alta Precisión

Aportan alta precisión y resolución espacial, siendo clave para la gestión de cuencas y la restauración ecológica.

Importancia en la Gestión Ambiental



El fingerprinting guía la toma de decisiones al vincular la ciencia con la acción , permitiendo una gestión más efectiva y focalizada.



02

Antecedentes Científicos

Evolución Histórica del Fingerprinting



Años 90

Uso de isótopos estándar ($\delta^{13}\text{C}$, $\delta^{15}\text{N}$) para rastrear contaminantes.



Año 2000

Surge el CSSI para analizar isótopos de compuestos orgánicos específicos.



Actualidad

Integración de CSSI y FRX para estudios multidimensionales y alta resolución.

Hitos Regulatorios y Normativos



ISO 14040 y Guía EPA

Fomentan el uso de trazadores isotópicos y elementales para el análisis de fuentes.



Directiva Marco del Agua (UE)

Incorpora el fingerprinting como herramienta de diagnóstico para la gestión de cuencas.



Legitimación y Aplicación

Estos marcos legitiman la aplicación de CSSI-FRX en auditorías ambientales y planes de restauración.



03

Trazadores CSSI y FRX

Principales Trazadores CSSI

$\delta^{13}\text{C}$

En n-alcanos y PAH para diferenciar fuentes biogénicas, petrogénicas y pirogénicas .

$\delta^2\text{H}$

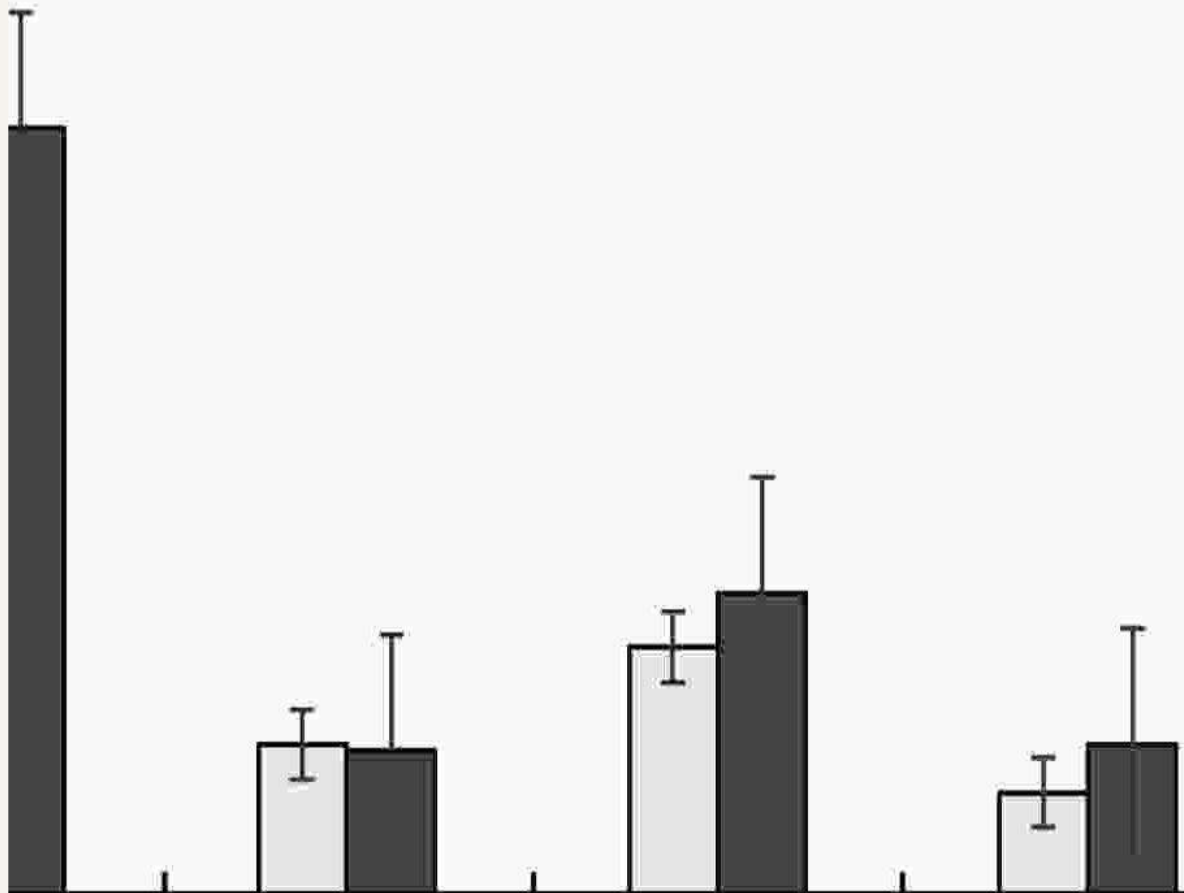
En lípidos para discriminar vegetación C3/C4 y zonas climáticas.

$\delta^{15}\text{N}$

En porfirinas para identificar fuentes de contaminación agrícola .

La combinación de múltiples isótopos **incrementa la robustez estadística** y reduce la ambigüedad en la asignación de origen.

表层土 ■ 深层土



指标元素

Elementos Clave en FRX

La FRX cuantifica elementos mayores y trazas, utilizando ratios para discriminar fuentes.

Elementos Mayores y Trazas
Si, Al, Fe, Cr, Ni, Cu, Zn, Pb, As.

Ratios Discriminatorios
Fe/Mn y Cr/Ni para mineras vs. antrópicas.

Indicadores Específicos
Ti y Zr (erosión), Pb y Sn (contaminación urbana).



04

Diseño de Muestreo

Estrategia de Muestreo Espacial

Se establece una malla sistemática adaptada a la morfología de la cuenca.



Áreas de Alta
Erosión



Descargas



Fondos de
Depósito

Se emplean **GPS diferenciales** y **SIG** para garantizar la representatividad estadística.

Muestreo Temporal y Frecuencia

Se programa campañas en diferentes épocas y se ajusta la frecuencia para construir series temporales robustas.



Épocas Seca y Lluviosa

Para capturar la variabilidad estacional.



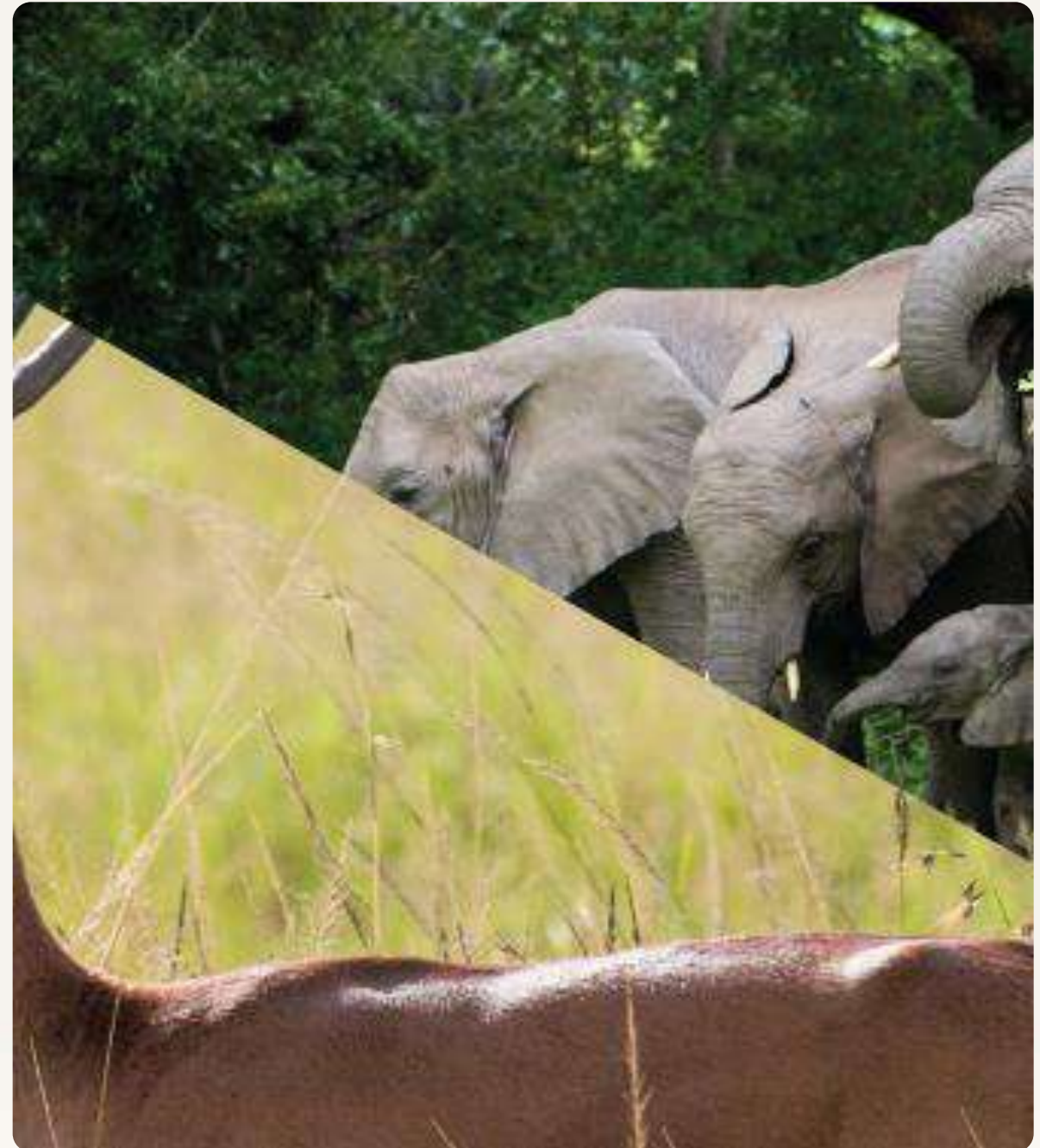
Eventos Extremos

Muestreo con autosamplers para registrar picos de contaminación.



Frecuencia Variable

Semanal en ríos pequeños, mensual en grandes.





05

Pretratamiento y Análisis

Preparación de Muestras para CSSI



**Secado y
Tamizado**
40 °C, <math>< 63 \mu\text{m}</math>



Extracción
Diclorometano/Metan
ol



Purificación
Cromatografía en sílice



Validación
Estándares certificados



Preparación de Muestras para FRX

Las muestras se preparan para su análisis en espectrómetro de dispersión de energía.



Molienda y Compactación

Molienda en mortero de ágata hasta $<50 \mu\text{m}$ y compresión en pastillas de 32 mm.



Aglutinante

Se añade un 10% de celulosa para mejorar la cohesión de la pastilla.



Calibración y Control

Se emplean estándares NIST para garantizar la calidad del análisis.

Análisis Isotópico GC-IRMS

Los compuestos separados por GC se interfasean con un espectrómetro de masas para medir la relación isotópica.



Precisión de Medición

$\delta^{13}\text{C}$: ± 0.2 ‰, $\delta^2\text{H}$: ± 3 ‰



Validación

Con estándares internacionales (IAEA-CH-7, USGS-61)



Tiempo de Análisis

~30 min por muestra





06

Modelos de Mezclas

Modelos de Mezcla Bayesianos

Se emplea software como **MixSIAR** para estimar la proporción de fuentes de manera probabilística.



Distribuciones Previas

Incorpora la variabilidad isotópica y elemental.



Modelo (MCMC)

1M iteraciones, considerando fraccionamiento y error.



Intervalos de Credibilidad

95% de intervalo para evaluar la incertidumbre.

Forward Analysis

$try] = \emptyset;$

h basic block B (entry)

$[B] = \emptyset;$

← all basic blocks **worklist** 初始化为所有BB

Worklist is not empty) 当worklist为空时, 循环

a basic block B from **Worklist**

$OUT = OUT[B]$ 用old_OUT记录上一轮的值,

$IN = \bigsqcup_{P \text{ a predecessor of } B} OUT[P];$ 控制流处理

$OUT[B] = gen_B \cup (IN[B] - kill_B);$ 转换函数处

old_OUT \neq OUT[B]) 如果处理前后, OUT值改变, 就
节点, 加入worklist;

add all successors of B to **Worklist**

OUT will not change if IN does not change

Optimización de Firmas

Se aplican análisis estadísticos para seleccionar los trazadores más eficaces y robustos.



Análisis Discriminante Stepwise

Para seleccionar trazadores con mayor poder de separación.



Reducción de Dimensionalidad (PCA)

Para simplificar el modelo y validar con análisis jackknife.



Exclusión de Trazadores

Se excluyen los redundantes o con alta variabilidad (>15%).

Resultado: 5-7 variables con clasificación correcta >90%.



07

Soluciones y Resultados

Caso de Estudio: Cuencas Mineras

La integración de CSSI y FRX permitió una gestión focalizada y eficiente.

Resultados CSSI

65% Escombreras | 25% Suelos Agrícolas | 10% Áreas Urbanas

Resultados FRX

Enriquecimiento de **As y Pb** en zonas de influencia de relaves.

Impacto y Resultado

Priorización de 3 subcuencas para restauración, reduciendo costos un 30% frente a estrategias convencionales.

Caso de Estudio: Contaminación Urbana

En un río urbano, las técnicas permitieron identificar las fuentes de PAH y metales.

CSSI: Diferenciando Combustibles

$\delta^{13}\text{C}$ de PAH distinguió diesel (-24 ‰) de gasolina (-27 ‰).

FRX: Detección de Metales

Identificó **Cu y Zn** en torno a descargas pluviales.

Modelo de Mezcla

El 70% de la carga metálica se originó en el tráfico rodado.

Seguimiento Post-Intervención

Dos años tras la revegetación de taludes mineros, los resultados mostraron una significativa recuperación.



Reducción de Sedimentos

40%

Menor aporte de fuente minera (CSSI).



Disminución de Metales

50%

Menos Pb y Zn en sedimentos (FRX).



Recuperación de Suelos

95%

Nivel de confianza en la eficacia.



08

Conclusiones y Prospectiva

Fortalezas del Enfoque Integrado

La combinación CSSI-FRX supera a los métodos clásicos en resolución y robustez.



Alta Resolución Química y Espacial

Permite una caracterización fina de las fuentes y su distribución.



Reducción de Incertidumbre

Los modelos bayesianos permiten estimaciones probabilísticas más fiables.



Transferibilidad y Escalabilidad

La metodología es aplicable a distintas cuencas y escalas geográficas.



Limitaciones y Desafíos



Fraccionamiento Isotópico

Procesos biogeoquímicos pueden alterar las firmas y sesgar las estimaciones.



Complejidad y Coste

Requiere laboratorios especializados y equipamiento de alto coste.



Firmas de Referencia

La disponibilidad de firmas para fuentes antrópicas es aún limitada.



Estandarización

Es crítica para garantizar la comparabilidad de los resultados entre laboratorios.



Líneas Futuras de Investigación

El campo del fingerprinting avanza hacia una mayor integración de datos y portabilidad.



Bases de Datos Abiertas

Desarrollo de repositorios compartidos de firmas isotópicas y elementales.



Nuevos Isótopos de Metales

Incorporación de $\delta^{65}\text{Cu}$, $\delta^{66}\text{Zn}$ para nuevos trazadores.



Machine Learning

Uso de algoritmos para mejorar la clasificación de fuentes complejas.



Miniaturización y Portabilidad

Desarrollo de GC-IRMS y FRX portátiles para análisis en campo.



09

Bibliografía y Recursos

Bibliografía Fundamental CSSI



Gibbs, M. M. (2008)

Identifying source soils in contemporary estuarine sediments. *Organic Geochemistry*, 39, 754–761.



Hancock, G. J., et al. (2019)


The use of $\delta^{13}\text{C}$ and $\delta^{15}\text{N}$ in sediments. *Science of the Total Environment*, 661, 179–187.




Massart-Pierard, S. et al. (2022)

Bayesian mixing models in sediment tracing. *Earth-Science Reviews*, 225, 103921.

Bibliografía Fundamental FRX

 **Marguí, E. et al. (2018)**
Portable XRF for environmental analysis. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 108, 13–25.

 **Weindorf, D. C. et al. (2020)**
Advances in pXRF applications. *Geoderma*, 375, 114–130.

 **Radu, T. & Diamond, D. (2021)**
Quality control in XRF sediment analysis. *Journal of Hazardous Materials*, 403, 123671.

Recursos en Línea y Bases de Datos



IAEA Stable Isotope

Reference

nucleus.iaea.org



USGS Sediment Isotope

apps.usgs.gov



R packages: MixSIAR, siar

Análisis de mezclas bayesianas



Repositorios GitHub

[open-fingerprinting](#),
[sedMix](#)

THANK YOU



Kimi AI

2025/01/01