

Sumario Anexo A

A	MANUAL DEL USUARIO	3
A.1	Introducción	3
A.2	Fundamentos teóricos	4
A.2.1	Fundamentos teóricos del modelo de transporte	4
A.2.2	Fundamentos teóricos del modelo de cálculo de riesgo	7
A.3	Datos iniciales	9
A.4	Visualización de resultados	13
A.5	Mensajes de error	15





A Manual del usuario

A.1 Introducción

El programa que se presenta en este manual es una herramienta de análisis de riesgo en emplazamientos contaminados con especies inorgánicas. Esta herramienta integra en un entorno Excel modelos matemáticos de transporte de contaminantes a través del subsuelo y las aguas subterráneas, así como las ecuaciones que permiten cuantificar el riesgo para la salud humana derivado de esta contaminación.

Los contaminantes contemplados son los incluidos en la lista presentada en febrero de 2006 por la Agència de Residus de Catalunya al publicar los *Niveles Genéricos de Referencia para metales y protección de la salud humana aplicables a Catalunya*:

<i>Contaminantes considerados en el análisis de riesgo</i>	
Antimonio	Estaño
Arsénico	Mercurio
Bario	Molibdeno
Berilio	Níquel
Cadmio	Plomo
Cobalto	Selenio
Cobre	Talio
Cromo (III)	Vanadio
Cromo (VI)	Zinc

Tabla A.1 Contaminantes considerados en el análisis de riesgo

En lo que respecta el transporte de contaminantes, se contempla el transporte vertical de los contaminantes a través del subsuelo desde la fuente hasta alcanzar el nivel freático, la dilución en el acuífero y el transporte horizontal en la dirección de éste hasta alcanzar el punto receptor. Los mecanismos de transporte considerados son la advección, la dispersión y la sorción.

Por otra parte, el modelo de cálculo del riesgo cuantifica por separado los efectos sistémicos y cancerígenos de las especies estudiadas, basándose en el análisis de toxicidad de éstas y en el análisis de la exposición de los receptores. El nivel de riesgo se calcula considerando un escenario residencial con dos receptores, una persona



adulto y un niño. Las rutas consideradas son la ingestión de agua contaminada y la ingestión vegetal regada con agua contaminada.

A.2 Fundamentos teóricos

A.2.1 Fundamentos teóricos del modelo de transporte

La herramienta ofrece al usuario la posibilidad de elegir dos situaciones de partida diferentes. En la primera de ellas, la fuente contaminante es una balsa o depósito de residuos líquidos cuyas filtraciones provocan que los contaminantes pasen al subsuelo y posteriormente alcancen el nivel freático. La segunda situación es un suelo en contacto con depósitos de residuos sólidos y contaminado por la lixiviación de contaminantes provocada por las precipitaciones. Debido a la infiltración, los contaminantes continúan migrando a través del subsuelo no contaminado hasta alcanzar el nivel freático. Una vez alcanzado, en ambos escenarios los contaminantes se desplazan en la dirección del acuífero hasta alcanzar el punto receptor. Las figuras A.1 y A.2 muestran las representaciones esquemáticas de ambos escenarios:

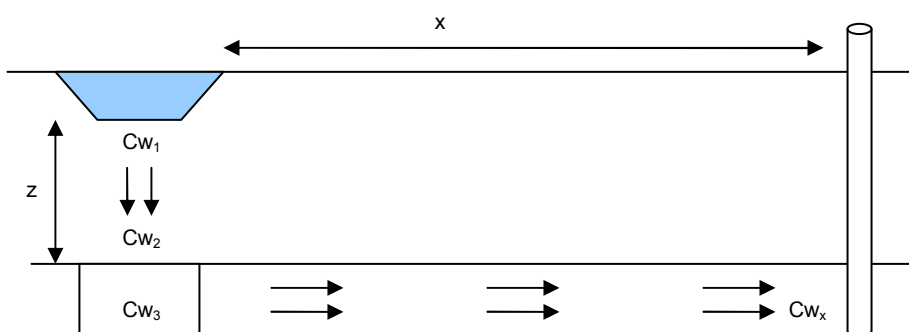


Figura A.1 Representación esquemática de un escenario de contaminación por pérdidas en balsas

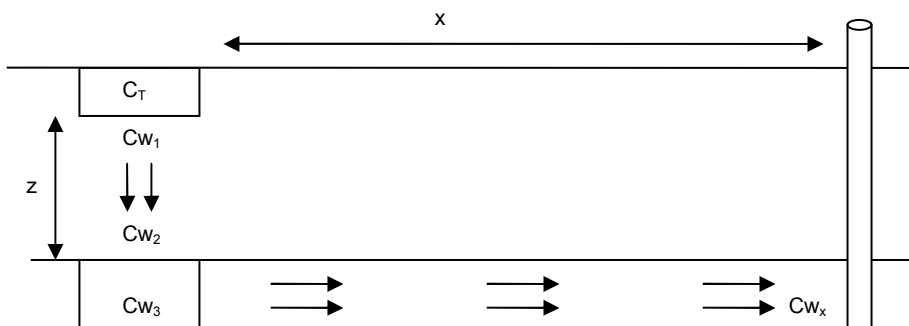


Figura A.2 Representación esquemática de un escenario de contaminación por infiltración de lixiviados



En el escenario de la balsa (escenario 1), se considera que la concentración inicial del contaminante en la fuente (C_{w1}) es igual a la concentración en la balsa. En el escenario del suelo (escenario 2), esta concentración se calcula mediante:

$$C_{w1} = \frac{C_T}{\left(K_d + \frac{\theta_w}{\rho_b}\right)} \quad (\text{Ec. A.1})$$

donde:

C_T = concentración total del contaminante en el suelo (mg/kg)

K_d = coeficiente de distribución del contaminante (l/kg)

ρ_b = densidad del suelo (kg/l)

θ_w = porosidad del agua (-)

Para calcular la concentración del contaminante al alcanzar el nivel freático (C_{w2}), se utiliza la siguiente ecuación

$$C_{w2}(z,t) = \frac{C_{w1}}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{R \cdot z - v_{fz} \cdot t}{2\sqrt{R \cdot D_{Lz} \cdot t}} \right) + \exp \left(\frac{v_{fz} \cdot z}{D_{Lz}} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{R \cdot z + v_{fz} \cdot t}{2\sqrt{R \cdot D_{Lz} \cdot t}} \right) \right] \quad (\text{Ec. A.2})$$

donde:

$$v_{fz} = \text{velocidad del fluido en la zona vadosa (m/d)} = \frac{Inf}{\theta_w}$$

Inf = tasa de infiltración (m/d)

$$R = \text{factor de retardo en la zona vadosa} = 1 + \frac{Kd \cdot \rho_b}{\theta_w}$$

z = distancia vertical desde la base la fuente al nivel freático (m) = $d_{nf} - d_s$

d_{nf} = profundidad del nivel freático (m)

d_s = profundidad de la fuente (m)

D_{Lz} = coeficiente de dispersividad longitudinal (m^2/d) = $\alpha_{Lz} \cdot v_{fz}$

α_{Lz} = dispersividad longitudinal (m) = $\ln \alpha_L = -4,933 + 3,811 \ln z \quad z \leq 2$

$\ln \alpha_L = -2,727 + 0,584 \ln z \quad z \geq 2$



La concentración C_{w3} corresponde a la concentración una vez el contaminante se diluye en el acuífero, y se obtiene aplicando el factor de dilución:

$$C_{w3} = C_{w2} / DF \quad (\text{Ec. A.3})$$

DF = factor de dilución (-)

$$DF = 1 + \frac{K \cdot i \cdot d}{Inf \cdot L} \quad (\text{Ec. A.4})$$

K = conductividad hidráulica del acuífero (m/d)

i = gradiente hidráulico del acuífero (m/m)

L = longitud de la fuente en la dirección paralela al flujo de agua (m)

d = profundidad de la zona de mezcla (m)

$$d = (0,0112 \cdot L^2)^{0,5} + d_a \cdot \{1 - \exp[(-L \cdot Inf) / (K \cdot i \cdot d_a)]\} \quad (\text{Ec. A.5})$$

d_a = grosor del acuífero (m)

Por último, para simular el transporte horizontal a través del acuífero y obtener la concentración en el punto receptor (C_{wx}) se utiliza el modelo de Domenico:

$$C_{wx}(x, t) = \frac{C_{w3}}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - v_{cx} \cdot t}{2 \cdot \sqrt{\alpha_{Lx} \cdot v_{cx} \cdot t}} \right) \right] \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{Y}{4 \cdot \sqrt{\alpha_T \cdot x}} \right] \right\} \left\{ \operatorname{erf} \left[\frac{Z}{2 \cdot \sqrt{\alpha_V \cdot x}} \right] \right\} \quad (\text{Ec. A.6})$$

donde:

x = distancia de la fuente al receptor (m)

v_{cx} = velocidad del contaminante en la zona saturada (m/d) = $\frac{v_{fx}}{R}$

v_{fx} = velocidad del fluido en la zona saturada (m/d) = $\frac{K \cdot i}{n_e}$

R = factor de retardo en la zona saturada = $1 + \frac{\rho_b \cdot K_d}{n_e}$

Y = ancho de la pluma debajo de la fuente (m) = L

Z = grosor de la pluma debajo de la fuente (m) = d

α_L = dispersividad longitudinal (m) = $0,1 \cdot x$



$$\alpha_v = \text{dispersividad vertical (m)} = 0,056 \cdot \alpha_L$$

$$\alpha_T = \text{dispersividad transversal (m)} = 0,33 \cdot \alpha_L$$

A.2.2 Fundamentos teóricos del modelo de cálculo de riesgo

A partir de las concentraciones calculadas en el punto receptor, se calcula la dosis (mg/kg·d) recibida por cada uno de los dos receptores (adulto y niño) a través de las dos rutas de exposición consideradas: ingestión de agua contaminada (ruta 1) e ingestión de vegetales regados con agua contaminada (ruta 2). El escenario considerado es un escenario residencial.

Cálculo de la dosis (D):

$$D = \frac{C \cdot IR \cdot F \cdot EF \cdot ED}{BW \cdot AT \cdot 365d / \text{año}} \quad (\text{Ec. A. 7})$$

Ruta 1: C = Concentración contaminante en el agua, C_{wx} (mg/l)

Ruta 2: C = Concentración contaminante en la planta, C_{plant} (mg/kg)

$$C_{plant} = C_w \cdot Br \cdot Kd \cdot (1 - 0,85)$$

Br = factor de bioconcentración ((mg cont/kg vegetal)/(mg cont/kg suelo))

En la tabla A.2 se describen los parámetros necesarios para calcular la dosis, y se muestran los valores estándar utilizados por la herramienta, dependiendo del receptor (adulto o niño), y del tipo de efecto (cancerígeno o sistémico):

Parámetros exposición			Adulto		Niño	
			Cancerígeno	Sistémico	Cancerígeno	Sistémico
IR_w	Tasa de ingestión agua	l/d	2	2	1	1
IR_{plant}	Tasa de ingestión vegetales	kg/d	0,2145	0,2145	0,1043	0,1043
EF	Frecuencia exposición	d/año	350	350	350	350
ED	Duración exposición	años	24	30	6	6
BW	Peso de la persona	kg	70	70	15	15
AT	Tiempo promedio	años	70	30	70	6
F_w	Porcentaje agua cont.	-	1	1	1	1
F_{plant}	Porcentaje vegetales cont	-	0,25	0,25	0,25	0,25

Tabla A.2 Tabla resumen de los parámetros de exposición



Cálculo del riesgo

Como se ha comentado anteriormente, el programa calcula de forma diferencial el riesgo sistémico del cancerígeno:

- Riesgo sistémico (Coeficiente de peligro)

Para cada una de las rutas, el riesgo sistémico se cuantifica mediante el coeficiente de peligro:

$$CP = D/RfD_o \quad (\text{Ec. A.7})$$

RfD_o = Dosis de referencia oral (mg/kg·d)

Al considerar dos receptores, debe utilizarse el máximo valor de CP:

$$CP = \text{MAX} (CP_{\text{adulto}}, CP_{\text{niño}}) = \text{MAX} (D_{\text{adulto}}/RfD_{o \text{ crónica}}, D_{\text{niño}}/RfD_{o \text{ subcrónica}}) \quad (\text{Ec. A.8})$$

Por último, las rutas se consideran aditivas al compartir vía de exposición (oral), por lo que el CP total se obtiene como indica la ecuación A.9:

$$CP_{\text{TOTAL}} = CP_{\text{agua}} + CP_{\text{plantas}} \quad (\text{Ec. A.9})$$

En términos de protección de la salud humana, se asume que, para sustancias con efectos sistémicos, una situación de riesgo aceptable aquella en que, para cada sustancia, el coeficiente de peligro es inferior a la unidad.

- Riesgo cancerígeno (Rc)

Para cada una de las rutas, el riesgo cancerígeno (Rc) se calcula de la siguiente manera:

$$Rc = D \cdot SF_o \quad (\text{Ec. A.10})$$

SF_o = oral slope factor (mg/kg·d)⁻¹

En el caso de los efectos cancerígenos, las dosis se consideran aditivas a lo largo de la vida del receptor:

$$Rc = Rc_{\text{niño}} + Rc_{\text{adulto}} = (D_{\text{niño}} + D_{\text{adulto}}) \cdot SF_o \quad (\text{Ec. A.11})$$



Por último, y al igual que en el caso de los efectos sistémicos, las rutas se consideran aditivas, por lo que el Rc total se obtiene como indica la ecuación A.12:

$$Rc_{TOTAL} = Rc_{agua} + Rc_{plantas} \quad (\text{Ec. A.12})$$

En términos de protección de la salud humana, se asume que, para sustancias cancerígenas, una situación de riesgo aceptable es aquella en que la frecuencia esperada de aparición de cáncer en la población expuesta no excede en uno por cada cien mil casos, es decir, Rc inferior a 10^{-5} .

A.3 Datos iniciales

A continuación se muestra la página inicial de la herramienta, donde el usuario debe introducir los datos específicos del escenario que quiere simular:

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1												
2												
3												
4			Escenario	1								
5												
6			Datos del emplazamiento									
7		L	longitud fuente	m			x (m)					Cw1 (mg/l)
8		Inf	tasa infiltración	m/d			t (d)					Antimonio
9		n _e	porosidad efectiva	-								Arsénico
10		θ _a	porosidad agua	-								Bario
11		ρ _b	densidad suelo	g/cm ³								Berilio
12		d _a	grosor acuífero	m								Cadmio
13		K	conductividad hidráulica	m/d								Cobalto
14		i	gradiente hidráulico	m/m								Cobre
15		d _f	profundidad fuente	m								Cromo (III)
16		d _{fr}	profundidad nivel freático	m								Cromo (VI)
17												Estaño
18												Mercurio
19												Molibdeno
20												Niquel
21												Plomo
22												Selenio
23												Talio
24												Vanadio
25												Zinc
26												
27												
28												
29												
30												
31												

Figura A.3 Hoja inicial del programa



Escenario

Debe elegirse uno de los dos escenarios comentados anteriormente, introduciendo en la casilla **Escenario** un **1** para simular la contaminación provocada por las pérdidas de una balsa, o un **2** para simular la lixiviación de contaminantes presentes en un suelo:

Escenario	1	Balsa
	2	Suelo contaminado

Datos del emplazamiento

Deben introducirse las características hidrogeológicas del emplazamiento, así como las dimensiones de la fuente.

A continuación se detallan los parámetros necesarios:

Datos del emplazamiento			
L	longitud fuente	m	
Inf	tasa infiltración	m/d	
n_e	porosidad efectiva	-	
θ_w	porosidad agua	-	
ρ_b	densidad suelo	g/cm ³	
d_a	grosor acuífero	m	
K	conductividad hidráulica	m/d	
i	gradiente hidráulico	m/m	
d_s	profundidad fuente	m	
d_{fr}	profundidad nivel freático	m	

Parámetro	Definición
Longitud de la fuente (m)	Longitud de la fuente en la dirección paralela al flujo de agua subterránea (ver fig. A.4)
Tasa de infiltración (m/d)	Corresponde al movimiento vertical de infiltración del agua a través del subsuelo. Depende de las precipitaciones y el tipo de suelo, y, en el caso de la balsa, de su profundidad y aislamiento.
Porosidad efectiva (-)	Es el ratio adimensional entre el volumen ocupado por los poros y el ocupado por el total de la matriz sólida. Valores más habituales: Arcillas 0,01 – 0,20 Limos 0,01 – 0,30 Arena fina 0,10 – 0,30 Arena media 0,15 – 0,30 Arena gruesa 0,20 – 0,35 Gravas 0,10 – 0,35
Porosidad del agua (-)	Macroporosidad: ratio adimensional del volumen de poros ocupados por el agua respecto al volumen total de la matriz sólida.



Densidad del suelo (g/cm^3)	Densidad de la matriz sólida. Los valores más comunes se encuentran entre 1,5 y 1,7 g/cm^3
Grosor del acuífero (m)	Corresponde a la distancia vertical desde el nivel freático a la capa impermeable inferior que confina al acuífero (ver fig. A.4)
Conductividad hidráulica (m/d)	Conductividad hidráulica horizontal del medio saturado. Es el coeficiente de proporcionalidad que describe la capacidad del acuífero para transmitir el agua. Valores más habituales: Arcillas: $<10^{-6}$ cm/s Limos: 10^{-6} - 10^{-3} cm/s Arenas: 10^{-5} - 1cm/s Gravas: >1 cm/s
Gradiente hidráulico (m/m)	Se define como la pendiente del nivel freático. Los valores más habituales se encuentran entre 0,0001 y 0,05.
Profundidad de la fuente (m)	Escenario 1: Profundidad de la balsa (sólo de la parte que está por debajo de la superficie del suelo) Escenario 2: Profundidad de la zona del suelo contaminada (ver fig. A.4)
Profundidad del nivel freático (m)	Corresponde a la distancia vertical de la superficie al nivel freático (ver fig. A.4)

Tabla A.3 Definición de los parámetros iniciales

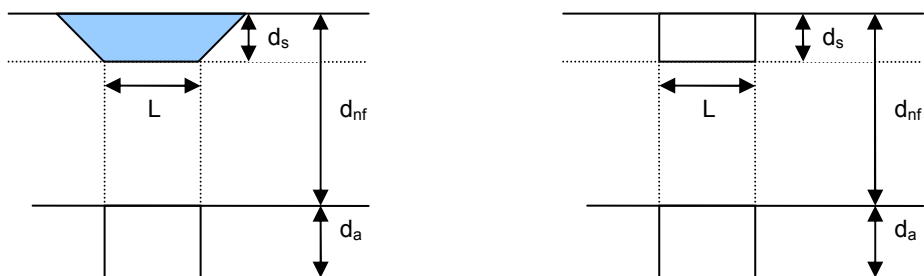


Figura A.4 Representación gráfica de los parámetros iniciales



Distancia fuente-receptor y tiempo transcurrido

El programa calculará las concentraciones y el riesgo en función de la distancia que separa la fuente del receptor (x), y el tiempo transcurrido desde el inicio de la contaminación (t).

x (m)	
t (d)	

Concentraciones de los contaminantes presentes en la fuente

Deben introducirse las concentraciones iniciales en la fuente de los metales presentes. Para aquellos que no estén presentes o no sean de interés, introducir un 0 o dejar la casilla en blanco. Si se ha elegido *escenario 1* (balsa), las concentraciones que deben introducirse son las concentraciones de los contaminantes en las aguas de la balsa, C_{w1} (mg/l), mientras que si se trata del *escenario 2* (suelo contaminado), deben introducirse las correspondientes al suelo, C_T (mg/kg).

	Cw1 (mg/l)
Antimonio	
Arsénico	
Bario	
Berilio	
Cadmio	
Cobalto	
Cobre	
Cromo (III)	
Cromo (VI)	
Estaño	
Mercurio	
Molibdeno	
Níquel	
Plomo	
Selenio	
Talio	
Vanadio	
Zinc	

	Cs(mg/kg)
Antimonio	
Arsénico	
Bario	
Berilio	
Cadmio	
Cobalto	
Cobre	
Cromo (III)	
Cromo (VI)	
Estaño	
Mercurio	
Molibdeno	
Níquel	
Plomo	
Selenio	
Talio	
Vanadio	
Zinc	

Parámetros de exposición

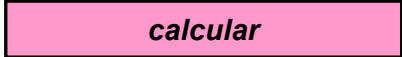
La herramienta proporciona unos parámetros estándar representativos de la exposición de un adulto y un niño en escenario residencial. Pueden ser modificados para simular otros escenarios.

Parámetros de exposición			Adulto		Niño	
			Cancerígeno	Sistémico	Cancerígeno	Sistémico
IR _{water}	Tasa ingestión agua	l/d	2	2	1	1
IR _{plant}	Tasa ingestión vegetales	kg/d	0,2145	0,2145	0,1043	0,1043
EF	Frecuencia de exposición	d/año	350	350	350	350
ED	Duración de la exposición	años	24	30	6	6
BW	Peso de la persona	kg	70	70	15	15
AT	Tiempo promedio	años	70	30	70	6
F _{water}	Factor agua cont	-	1	1	1	1
F _{plant}	Factor vegetales cont	-	0,25	0,25	0,25	0,25



A.4 Visualización de resultados

Una vez introducidos los datos iniciales, pulsar el botón **calcular** para que las tablas y gráficos se actualicen.



Para pasar a la hoja de resultados de concentraciones, pulsar



Los resultados se muestran en forma de tabla de los valores de concentración (mg/l) respecto a la distancia a la fuente (x), así como de forma gráfica:

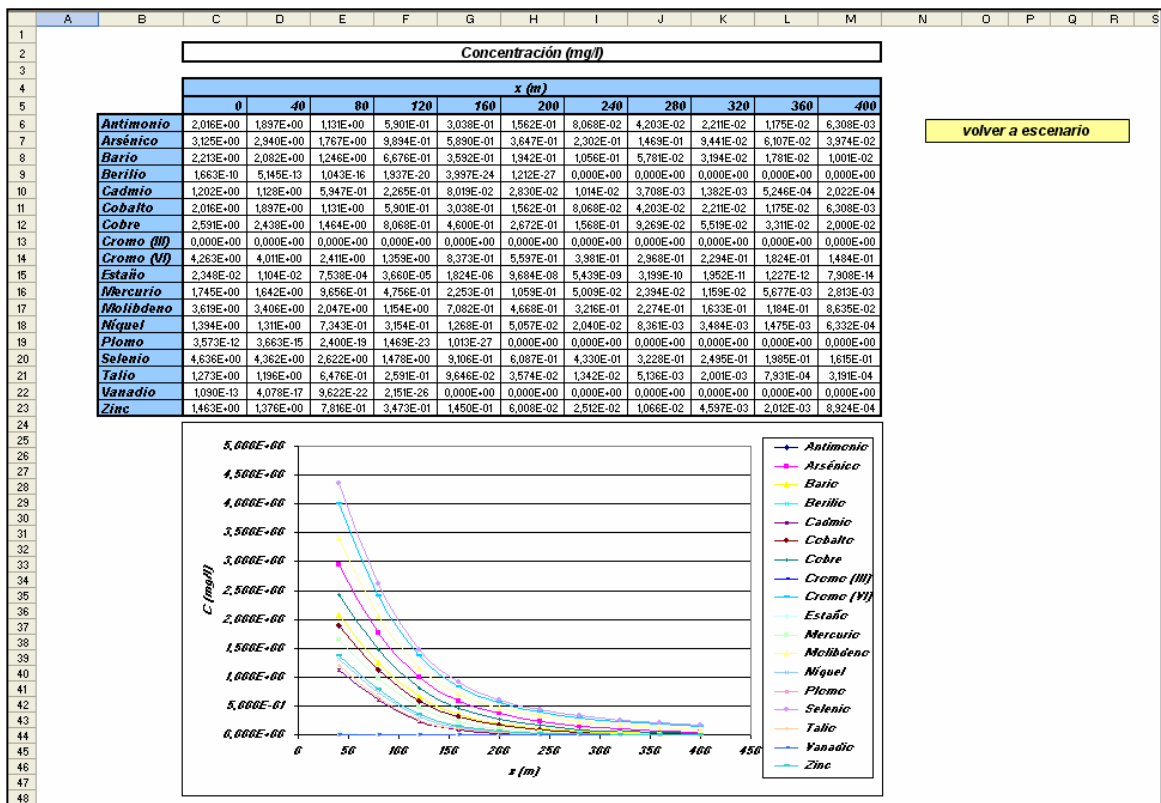


Figura A.1 Ejemplo de visualización de los resultados de concentración en función de la distancia

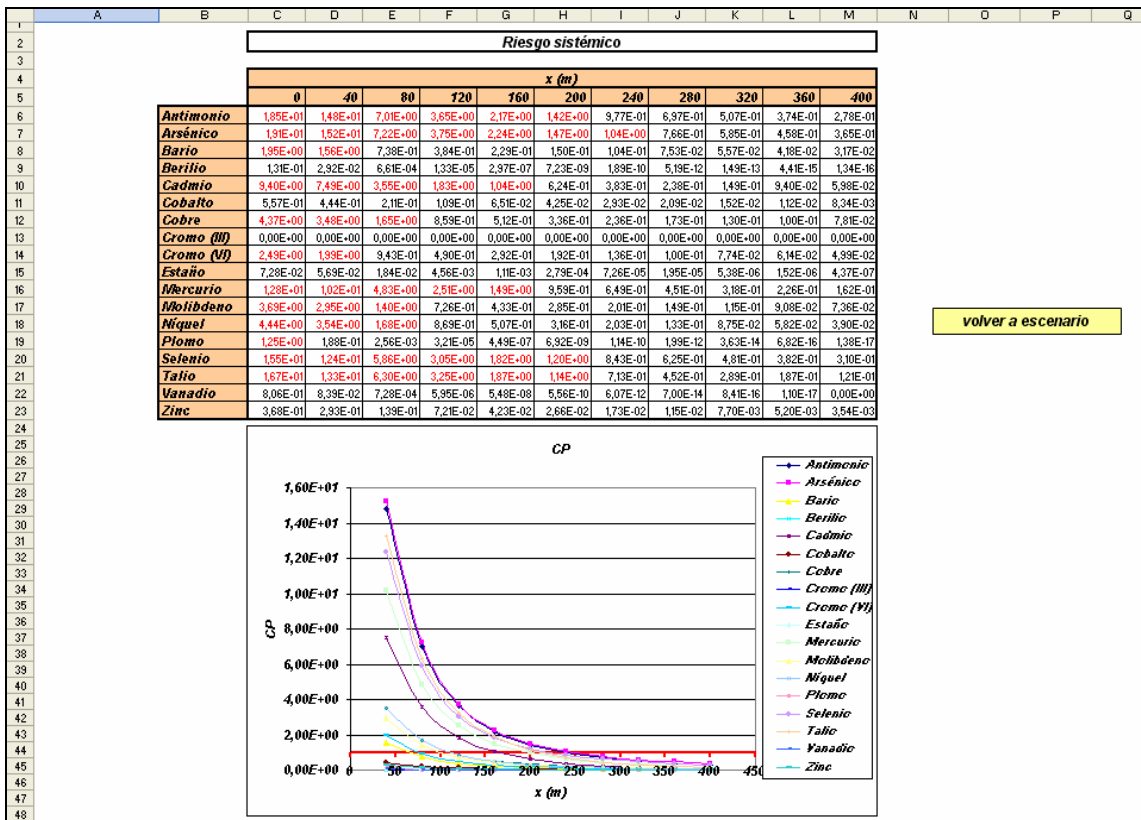
Para pasar a la hoja de resultados de riesgo sistémico, pulsar



Los resultados se muestran en forma de tabla de valores del coeficiente de peligro (CP) respecto a la distancia a la fuente (x), así como de forma gráfica. Los valores que



superan la unidad aparecen en rojo, indicando la presencia de un nivel de riesgo por encima del nivel aceptable:



volver a escenario

Figura A.2 Ejemplo de visualización de resultados de coeficiente de peligro (CP) en función de la

Para pasar a la hoja de resultados de riesgo cancerígeno, pulsar

riesgo cancerígeno

Los resultados se muestran en forma de tabla de valores de riesgo cancerígeno (Rc) respecto a la distancia a la fuente (x), así como de forma gráfica. Sólo aparecen valores para el caso del As, ya que es el único de los metales estudiados que presenta efectos cancerígenos por vía oral. Los valores en rojo indican que están por encima del nivel de riesgo aceptable:



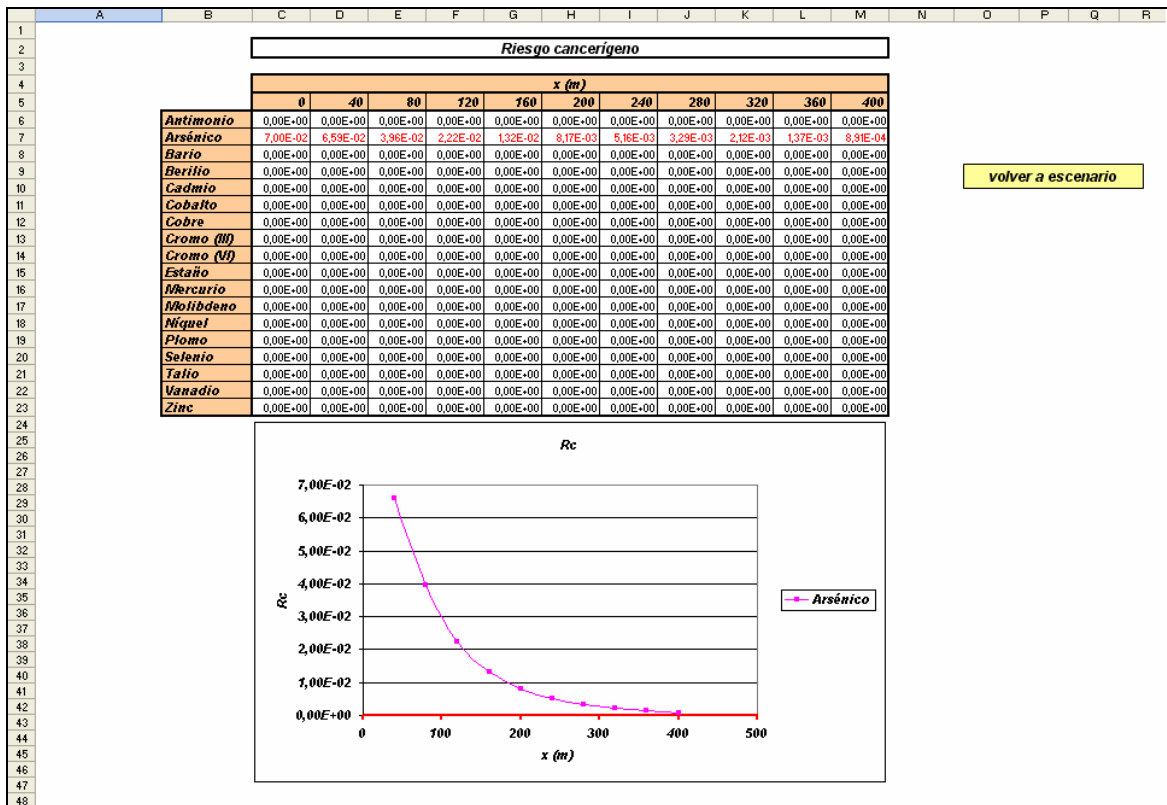
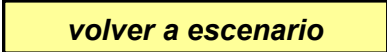


Figura A.3 Ejemplo de visualización de resultados de riesgo cancerígeno (Rc) en función de la distancia

Desde cada una de las hojas de resultados se puede volver a la hoja inicial mediante el botón



A.5 Mensajes de error

Si el nivel de seguridad de su equipo es alto, al abrir el archivo aparecerá un mensaje comunicando que las macros han sido deshabilitadas. Para poder ejecutar el programa es necesario modificar el nivel de seguridad a medio o bajo.

Si al visualizar los resultados de concentraciones en lugar de aparecer los datos aparece en todas las celdas el mensaje #¿NOMBRE?, debe instalarse el complemento de Excel *Herramientas para análisis-VBA*, necesario para que el programa calcule la función error.

