



01177

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO**

**PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO
EN INGENIERÍA (INGENIERÍA AMBIENTAL)**

**EVALUACIÓN DE LA MIGRACIÓN DE CONTAMINANTES
MEDIANTE EL USO DE UN MODELO GEOHIDROLÓGICO Y
SU APLICACIÓN EN EVALUACIONES DE RIESGO A LA
SALUD**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRA EN INGENIERÍA (AMBIENTAL)

P R E S E N T A:

ING. MARICRUZ LÓPEZ LÓPEZ

DIRECTORA: DRA. ROSARIO ITURBE ARGÜELLES

**UNAM
POSGRADO** 

MÉXICO, D.F. 2005

m. 341028



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE: Maricruz López López

FECHA: 14 febrero 2005

FIRMA: 



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA

UNIVERSIDAD NACIONAL
 AVENIDA DE
 MEXICO

VOTOS APROBATORIOS

DR. WILFRIDO RIVERA GOMEZ FRANCO
 Coordinador del Programa de Posgrado
 en Ingeniería, U N A M
 P r e s e n t e

Por este medio comunico a usted que he leído la tesis titulada:
 "EVALUACION DE LA MIGRACION DE CONTAMINANTES MEDIANTE EL USO DE UN MODELO
 GEOHIDROLOGICO Y SU POSTERIOR APLICACIÓN EN EVALUACIONES DE RIESGO A LA
 SALUD" para obtener el grado de MAESTRA EN INGENIERIA en el campo del
 conocimiento INGENIERIA AMBIENTAL, que presenta la alumna MARICRUZ LOPEZ
 LOPEZ.

Al mismo tiempo me permito informarle mi decisión de otorgar o no el voto
 aprobatorio.

JURADO		VOTO		
		APROBATORIO	FIRMA	FECHA
PRESIDENTE	DRA. CHRISTINA SIEBE GRABACH	(SI) (NO)	<i>Christina Siebe</i>	1/02/05
VOCAL	DRA. ROSARIO ITURBE ARGÜELLES	(SI) (NO)	<i>Rosario Iturbe</i>	30/08/04
SECRETARIO M EN C.	VICENTE FUENTES GEA	(SI) (NO)	<i>V. Fuentes</i>	05/11/08
SUPLENTE	M EN C. LANDY IRENE RAMIREZ BURGOS	(SI) (NO)	<i>Landy Irene</i>	5/10/04
SUPLENTE	DRA. GEORGINA FERNANDEZ VILLAGOMEZ	(SI) (NO)	<i>Georgina Fernandez</i>	04/16/04

AGRADECIMIENTOS

A Dios por darme el regalo de vivir, realizar y disfrutar cada uno de mis logros.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, en especial a las dependencias de está, como son la Facultad de Ingeniería, el Instituto de Ingeniería y el Instituto de Química.

A la Dra. Rosario Iturbe Argüelles por darme la oportunidad de realizar este trabajo bajo su dirección.

A los miembros de mi jurado: Dra. Christina Siebe Grabach, M en C. Vicente Fuentes Gea, M en A. Landy Irene Ramírez Burgos y Dra. Georgina Fernández Villagómez por el tiempo dedicado a la lectura y revisión de esta tesis.

A Guillermina Pérez, Alejandrina Castro, Rosa Maria Flores, Adriana Ramírez y Guadalupe Bautista por su ayuda durante el desarrollo de este trabajo.

DEDICATORIAS

A la memoria de mis padres y de mi abuelito, que siempre están conmigo.

A Lupita por todo su apoyo y experiencias compartidas, por estar siempre para lo que sea.

A Estela por sus palabras de aliento.

A Víctor por su ayuda, su compañía y su entereza.

A Angélica por su carácter y alegría.

A mis hermanos Luis, Maru, Juan, Miguel, Víctor, María, Marcela y Martha, por su confianza y su apoyo de toda la vida, por estar en todo momento para mí.

A Miguel por compartir y escuchar mis angustias y apoyar mis decisiones.

A Sara por escucharme y compartir mis alegrías y mis tristezas.

Muy especialmente a Rosy por estar siempre ahí, por ser un persona tan especial para mí, por todo el apoyo brindado en cada instante.

A Quique por sus enseñanzas, por sus consejos y apoyo.

A mis sobrinos Quique, Juanito y Monse por compartir conmigo, por aplaudir mis logros y sobre todo por ser mi familia.

A los latosos, Luis Mario, Eric Jafet, Mario Daniel y Jesús Jared por su cariño y su inocencia.

A Bernarda y Lucy por ser mis cuñadas favoritas-, de las dos he recibido mucho apoyo, palabras de aliento y confianza, gracias por ser mis hermanas.



CONTENIDO	Página
Índice de Tablas	III
Índice de Figuras	IV
Resumen	V
Capítulo 1	
INTRODUCCIÓN	1
1.1 Justificación	1
1.2 Antecedentes	2
▪ Muestreo del suelo	3
▪ Muestreo de agua subterránea	3
Capítulo 2	
OBJETIVOS	5
Capítulo 3	
MARCO TEÓRICO	7
3.1 Modelo hidrogeológico	7
3.1.1 Método de las diferencias finitas	7
3.1.2 Ecuación de Transporte	8
3.1.3 Propiedades requeridas por el modelo Modflow	10
3.2 Evaluación de riesgo	14
3.2.1 Exposición a compuestos químicos	14
3.2.2 Identificación y evaluación de las fuentes de compuestos químicos	15
3.2.3 Evaluación de riesgo a la salud	15
3.2.4 El modelo RBCA (Risk Based Corrective Action)	18
3.2.5 Ecuaciones empleadas en el modelo de riesgo a la salud RBCA (Risk Based Corrective Action)	20
3.3 Toxicidad de los compuestos estudiados	24
3.3.1 Toxicidad del Benceno	24
3.3.2 Toxicidad del Tolueno	24
3.3.3 Toxicidad del Vanadio	25
3.3.4 Toxicidad del Hierro	26

Capítulo 4		27
METODOLOGÍA		
4.1 Muestreo de Suelo y de Agua Subterránea		27
4.2 Metodología		29
4.3 Selección de los contaminantes a evaluar		30
4.4 Modelo geohidrológico visual modflow		31
4.4.1 Modpath		32
4.4.2 Visual modflow		32
4.4.3 Diseño de la malla		33
4.4.4 Pozos de bombeo		34
4.4.5 Propiedades		34
4.4.6 Condiciones de Frontera		35
4.4.7 Pozos de Monitoreo		36
4.4.8 Calibración del plano de dispersión		36
4.4.9 Velocidades		37
4.4.10 Zona supuesta		37
4.5 Modelo para la evaluación de riesgo a la salud		38
4.5.1 Parámetros de suelo par la evaluación de riesgo con RBCA		39
4.5.2 Parámetros de agua subterránea par la evaluación de riesgo con RBCA		41
4.5.3 Parámetros de aire		41
Capítulo 5		
RESULTADOS Y DISCUSIÓN		42
Capítulo 6		
CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES		51
REFERENCIAS		53
ANEXOS		58
ANEXO A		58
ANEXO B		69

ÍNDICE DE TABLAS

Capítulo 4	
APLICACIÓN DE MODELOS	
Tabla 4.1 Propiedades generales requeridas por Modflow	38
Tabla 4.2 Factores de exposición	39
Parámetros de suelo	
Tabla 4.3 Hidrogeología	39
Tabla 4.4 Área de suelo afectado	40
Tabla 4.5 Valores de la columna de suelo	40
Parámetros de agua subterránea	
Tabla 4.6 Hidrogeología	41
Tabla 4.7 Valores de dispersión	41
Parámetros de aire	
Tabla 4.8 Dispersión en aire	41

Capítulo 5	
RESULTADOS Y DISCUSIÓN	
Tabla 5.1 Resultados del marco de trabajo RBCA	47
Tabla 5.2 Pluma de Dispersión para cada contaminante obtenidas con el modelo Modflow con la predicción o simulación a 2 años (dimensiones).	47
Tabla 5.3 Resultados de riesgo a la salud obtenidos a partir de la pluma de dispersión para cada contaminante	47



ÍNDICE DE FIGURAS

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

Figura 1.1 Puntos de Muestreo del sitio en estudio 4

Capítulo 3

MARCO TEÓRICO

Figura 3.1 Red de puntos discretos en el plano xy 8

Figura 3.2 Experimento de la columna de dispersión 12

Capítulo 5

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Figura 5.1 Puntos de muestreo para benceno 2000 43

Figura 5.2 Resultados de predicción de la pluma de dispersión de benceno (2años) 43

Figura 5.3 Resultados de predicción de la pluma de dispersión de benceno (10 años) 43

Figura 5.4 Puntos de muestreo para tolueno 2000 44

Figura 5.5 Resultados de predicción de la pluma de dispersión de tolueno (2años) 44

Figura 5.6 Resultados de predicción de la pluma de dispersión de tolueno (10 años) 44

Figura 5.7 Puntos de muestreo para vanadio 2000 45

Figura 5.8 Resultados de predicción de la pluma de dispersión de vanadio (2años) 45

Figura 5.9 Resultados de predicción de la pluma de dispersión de vanadio (10 años) 45

Figura 5.10 Puntos de muestreo para hierro 2000 46

Figura 5.11 Resultados de predicción de la pluma de dispersión de hierro (2años) 46

Figura 5.12 Resultados de predicción de la pluma de dispersión de hierro (10 años) 46



RESUMEN

Se determinó la contaminación en un sitio donde se procesan hidrocarburos y se obtuvieron las plumas de dispersión de la contaminación para el benceno, tolueno, vanadio y hierro, empleado el modelo geohidrológico Modflow.

Posteriormente se realizó una evaluación de riesgo a la salud, para lo cual se empleó el marco de trabajo Risk Basic Corrective Action (RBCA).

De acuerdo a las plumas de dispersión de contaminación por los compuestos orgánicos benceno, tolueno y por los metales vanadio y hierro, las zonas más contaminadas se encuentran al centro y sureste del sitio en estudio.

Se encontró que las concentraciones de benceno y vanadio presentan riesgo.

Se observó que el valor de riesgo obtenido para el benceno y el vanadio es mayor cuando se aplican los resultados de la pluma de dispersión por el modflow, que cuando sólo se hace la evaluación de riesgo con el marco de trabajo RBCA.

La influencia de un modelo sobre otro resultó ser notoria al aplicar primero el modelo que obtiene la pluma de dispersión y luego realizar la evaluación de riesgo, los límites resultantes son relativamente mayores que si sólo se aplicara el modelo RBCA. Por ello es conveniente aplicar ambos modelos cuando se realiza la evaluación de riesgo a la salud.



Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Justificación

En México la contaminación de suelos y acuíferos ocasionada por la industria petrolera se presenta durante las actividades de extracción, refinación, petroquímica, transporte, distribución, almacenamiento y comercialización, ya que existe un potencial de contaminación del ambiente por descargas de aguas de desecho así como por derrames y fugas de tanques y ductos.

Uno de los métodos para evaluar la contaminación del subsuelo en la zona saturada es mediante modelos geohidrológicos con los cuales se puede determinar la pluma de dispersión de los distintos contaminantes que se consideren (hidrocarburos poliaromáticos, PAH), metales (plomo, vanadio, hierro, zinc), hidrocarburos volátiles derivados de las gasolinas, etc.

Modflow es uno de los métodos más completos y de fácil uso para modelar aplicaciones prácticas en tres dimensiones y simular el transporte de los contaminantes. Este es un paquete integrado por Modflow, Modpath y MT3D. (Guiguer, N. *et al.*, 1999), (Zheng, C. 1990).

Por otra parte las evaluaciones de riesgo a la salud por hidrocarburos se realizan con el modelo Risk Basic Corrective Action (RBCA) el cual fue creado específicamente para derrames de hidrocarburos; sin embargo, existe mucha incertidumbre en su aplicación cuando no se conocen suficientemente los datos geohidrológicos del sitio así como la distribución de los contaminantes.

Para la evaluación del riesgo a la salud el modelo RBCA (Risk Based Corrective Action), desarrollado por la ASTM (American Society of Testing and Materials) integra las prácticas de exposición a los contaminantes y los factores geohidrológicos específicos del sitio. Originalmente el proceso RBCA se aplicó únicamente a sitios contaminados con hidrocarburos donde habían ocurrido derrames procedentes de tanques de almacenamiento; sin embargo, actualmente se ha ampliado su aplicación a sitios contaminados con compuestos químicos en general.

Lo importante del proceso RBCA es que a diferencia de la metodología tradicional para establecer niveles de limpieza basados en riesgo, una acción correctiva ya no se define como la remoción del contaminante del suelo o agua subterránea, sino que para que exista riesgo se debe demostrar que existe una exposición al compuesto en cuestión (Iturbe, 1999).

1.2 Antecedentes

En el 2002 se le solicitó al Grupo de Saneamiento de Suelos y Acuíferos del Instituto de Ingeniería la caracterización de un sitio contaminado con hidrocarburos derivados de diferentes procesos. El principal objetivo del estudio fue conocer la distribución de la contaminación del suelo por hidrocarburos y metales pesados para proponer las acciones necesarias para el saneamiento del suelo y del acuífero.

Los trabajos realizados por el Instituto de Ingeniería en el sitio contaminado incluyeron la recopilación y análisis de información en 364 sitios distribuidos en el predio de Ciudad Madero, Tamaulipas, así como la revisión y dictamen de la red de monitoreo de agua subterránea para determinar la calidad físico-química del agua que constituye el acuífero asociado al sitio y trabajos topográficos, los cuales consistieron en la instalación de 39 pozos de monitoreo.



El acuífero se encuentra en sedimentos marinos no consolidados (arcilla, arena y conglomerados), es un acuífero libre con niveles freáticos entre 1.5 m y 3 m, la dirección del flujo subterráneo es del noroeste al sureste.

La contaminación en la zona afectada durante años por las diversas actividades de la instalación se debe a una variedad de compuestos que han cambiado a lo largo del tiempo; por ejemplo, la gasolina que contenía plomo ya no se utiliza en la actualidad; sin embargo, ahora se utiliza metilterbutileter (MTBE) cuyos efectos en el ambiente son diferentes, por lo que se requieren análisis con los se obtenga información tanto de los contaminantes antiguos como de los actuales, y para ello se realizó un muestreo tanto en suelo como en agua subterránea. A continuación se mencionan los parámetros que se analizaron, tanto físicos como químicos en ambos medios.

Muestreo de suelo

Las muestras se obtuvieron a 20 cm por arriba del nivel freático, en un intervalo de profundidad entre 0.8 y 2.5 m, dependiendo de la ubicación del nivel estático. En total se obtuvieron 328 puntos. Cada punto fue identificado y ubicado mediante un receptor de señales vía satélite, tipo GPS.

Se analizó el siguiente perfil de hidrocarburos con la técnica EPA 8240 modificada de acuerdo a longitud de cadena de carbonos: Metilterbutileter (MTBE), Metilteramileter (TAME), Etilbenceno, Benceno, Tolueno, Xilenos, Diesel y gasolina.

Además se analizaron los siguientes metales con el método EPA 6010: cadmio, plomo, hierro, vanadio y zinc.

En laboratorio se determinaron los siguientes parámetros físicos: densidad aparente, densidad real, fracción de carbono orgánico, contenido de agua y porosidad; en campo se determinaron potencial Redox y pH.

Muestreo de agua subterránea

En 39 de los puntos de muestreo de suelo se instalaron piezómetros para monitoreo del agua subterránea. La ubicación de los piezómetros se seleccionó de acuerdo con el gradiente hidráulico, a fin de obtener información en las zonas de menor gradiente hidráulico.

INTRODUCCIÓN

Los análisis para las muestras de agua obtenidas de los piezómetros así como de las norias muestreadas, fueron los mismos que para las muestras de suelo; el pH se les determinó en el momento de obtenerlas.

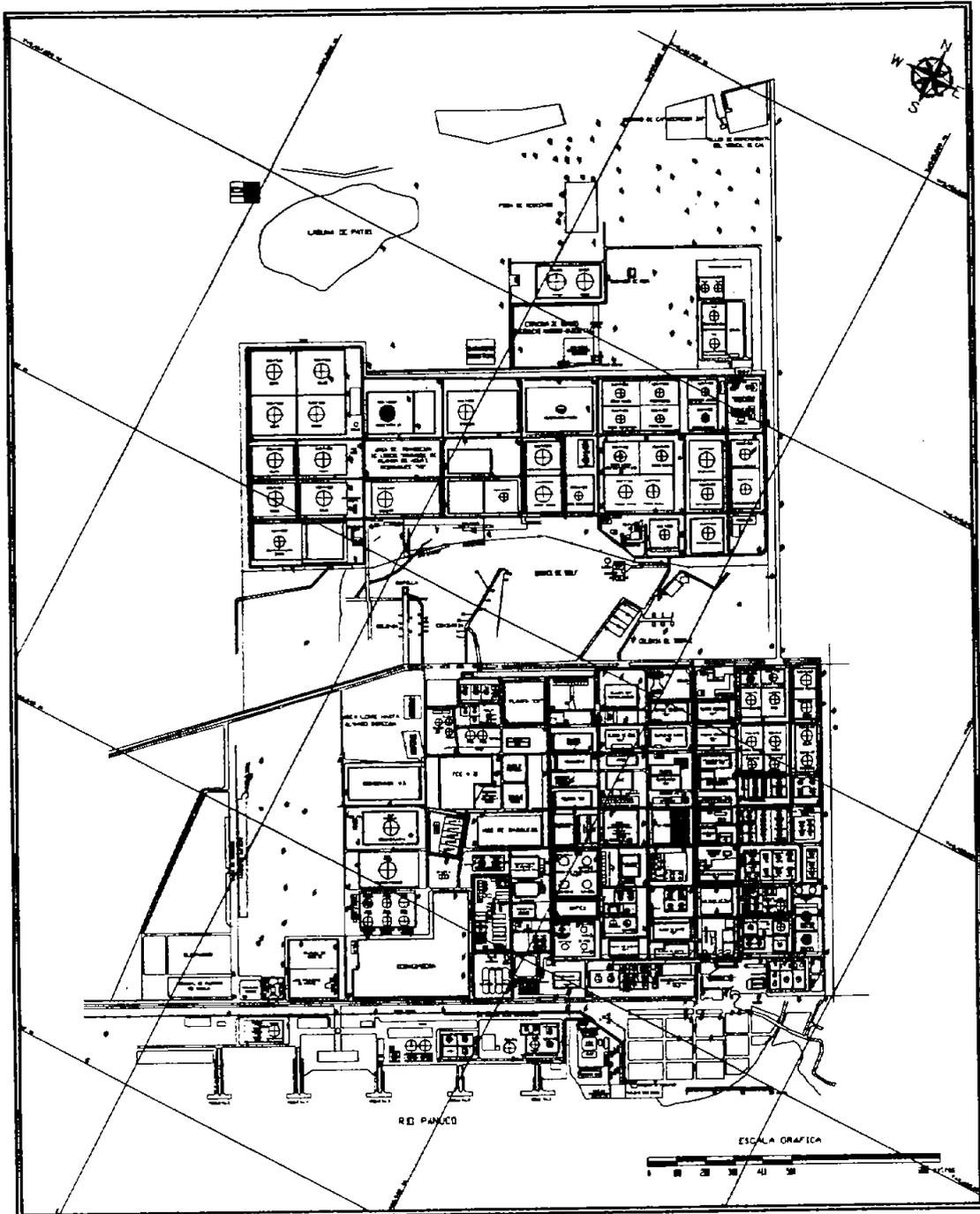


Figura 1.1 Puntos de Muestreo del sitio en estudio

Capítulo 2

OBJETIVOS

- ❑ Obtener la pluma de contaminación para dos compuestos orgánicos y dos metales con el modelo geohidrológico modflow.
- ❑ Utilizar los resultados del modelo geohidrológico modflow en la evaluación de riesgo a la salud con el modelo RBCA (Risk Basic Corrective Action).

Metas

- ❑ Aplicar el modelo geohidrológico modflow a las condiciones de un sitio contaminado con hidrocarburos.
- ❑ Aplicar los resultados del modelo geohidrológico modflow en el modelo RBCA.
- ❑ Establecer comparaciones de niveles de limpieza al aplicar el modelo RBCA con y sin la información del modelo geohidrológico.

Limitaciones

- ❑ La pluma de dispersión se obtendrá sólo para dos compuestos orgánicos y dos metales.

- ❑ En este trabajo se usan los datos y resultados de estudios previos realizados por el grupo de saneamiento de suelos y acuíferos del instituto de ingeniería para alimentar el modelo geohidrológico Modflow.



Capítulo 3

MARCO TEÓRICO

3.1 Modelo hidrogeológico

En muchos campos de la ciencia y la ingeniería los modelos matemáticos son usados frecuentemente para representar procesos complejos. Debido a ésto es muy común evaluar cantidades simultáneas por medio del modelo matemático, que corresponden a los valores de entrada del modelo. El modelo representa aspectos importantes del sistema.

El modelo hidrogeológico visual Modflow es un programa que realiza una simulación numérica a través del método de diferencias finitas con los nodos centrados en cada celda.

3.1.1 Método de las diferencias finitas

El modelo Modflow utiliza el método de las diferencias finitas, donde la discretización de una expresión matemática, una ecuación diferencial o integral que involucra funciones que son vistas como si tuvieran valores continuos infinitos dentro del dominio es aproximada mediante expresiones análogas que describen valores sólo en un número finito de puntos discretos en el dominio.



Las soluciones analíticas de las ecuaciones diferenciales parciales involucran expresiones matemáticas, las cuales proporcionan la variación de las variables continuamente dependientes en todo el dominio. En contraste las soluciones numéricas pueden proporcionar respuestas solamente a puntos discretos en el dominio, llamados red de puntos.

La siguiente figura muestra la sección de una red de puntos discretos en el plano xy . En esta figura se observa que la distancia entre los puntos sobre el eje x son uniformes y llamados Δx , al igual que la distancia entre los puntos sobre el eje y son uniformes y llamados Δy ; sin embargo Δx y Δy son diferentes. En general se considera que la distancia entre los puntos sobre el eje son uniformes, debido a que ésto simplifica en gran medida la ecuación.

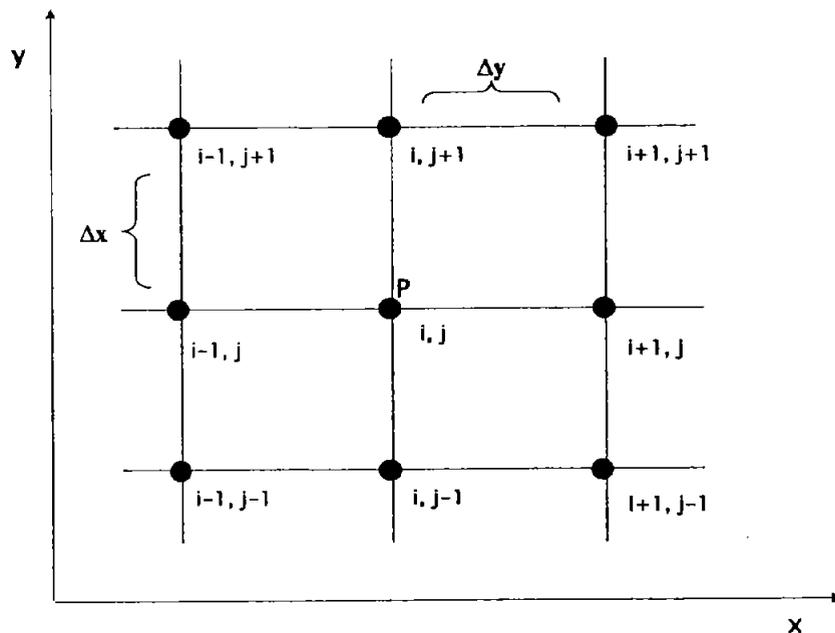


Figura 3.1 Red de puntos discretos en el plano xy

En la Figura 3.1 puede observarse que se indica con un índice i a los puntos que corren sobre el eje " x " y con un subíndice j a los puntos que corren sobre el eje " y ". Al centro del esquema se ubica el punto P .

3.1.2 Ecuación de Transporte

La ecuación de dispersión y transporte ha sido estudiada ampliamente por la importancia implícita que tiene su aplicación, así mismo por la complejidad de la resolución de los procesos involucrados, que son advección y dispersión.



La siguiente ecuación se utiliza para la dispersión y el transporte de compuestos o sustancias inmersas en un fluido:

$$\frac{\partial}{\partial t}(hC) + \frac{\partial}{\partial x}(huC) + \frac{\partial}{\partial y}(hvC) = \frac{\partial}{\partial x} \left[hk_{11} \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[hk_{12} \frac{\partial C}{\partial y} \right] + \left[\frac{\partial}{\partial y} hk_{21} \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[hk_{22} \frac{\partial C}{\partial y} \right]$$

(Ec. 1)

Donde:

x, y	Coordenadas cartesianas en un plano horizontal
T	Tiempo
h(x,y,t)	Tirante
C(x,y,t)	Concentración de la especie promediada en la profundidad
u(x,y,t)	Componente de la velocidad en la dirección x
v(x,y,t)	Componente de la velocidad en la dirección y
$K_{11}(x,y,t)$	Componentes del tensor de dispersión k
$K_{12}(x,y,t)$	
$K_{21}(x,y,t)$	
$K_{22}(x,y,t)$	

La ecuación anterior es el resultado de considerar un promedio de las variables dependientes en la profundidad (esta ecuación es válida para aguas subterráneas). Se denominan advectivos a los términos:

$$\frac{\partial}{\partial x}(huC) + \frac{\partial}{\partial y}(hvC) \tag{Ec. 2}$$

debido a que en éstos intervienen en las velocidades medias u y v. Estos términos representan el transporte del compuesto, sustancia o contaminante en la trayectoria del agua.

El transporte advectivo es dominante en cuerpos de agua, tales como ríos, y en el caso de la dispersión es dominante en aquellos donde no se tiene una dirección de flujo preferencial o principal.

3.1.3 Propiedades requeridas por el modelo Modflow

Las siguientes propiedades que son consideradas por el modelo Modflow se definen de forma breve:

Conductividad hidráulica

La conductividad hidráulica es una propiedad importante en los suelos y su valor depende del tamaño de los poros, mismos que están en función de la forma, tamaño y acomodo de las partículas del suelo.

La medición de la constante de permeabilidad o constante de conductividad hidráulica se hace por medio de parámetros los cuales pueden ser de nivel constante o de nivel variable. Los de nivel constante se usan generalmente para medir la permeabilidad de los materiales granulares y los de nivel variable preferentemente para materiales finos arcillosos, limo-arcillosos.

El coeficiente de conductividad hidráulica K se obtiene de la ecuación de Darcy, ya que

$$K = \frac{Q}{A(dh/dL)} \quad (\text{Ec. 3})$$

este coeficiente se determina experimentalmente para conocer la permeabilidad de un suelo, que es la propiedad de un material poroso que permite la infiltración de un fluido, como el agua a través de espacios vacíos (poros) interconectados.

Peso volumétrico

La peso volumétrico se define como el peso por unidad de volumen de suelo incluyendo el espacio poroso. El suelo es un medio poroso el cual contiene agua y aire entre las partículas sólidas orgánicas e inorgánicas. En este concepto es importante considerar los vacíos. El agua y el aire son componentes importantes en el suelo que se ven afectados por el espacio poroso en su dinámica de aireación y movimiento del agua.



Coefficiente de distribución

El coeficiente de distribución o K_d , se determina con base en las interacciones soluto-suelo. A mayor afinidad del soluto con la fase del suelo, el soluto será adsorbido en mayor grado y el valor de K_d será mayor.

Los solutos que se adsorben más son aquellos que presentan un comportamiento hidrofóbico acentuado.

A mayor contenido de carbono orgánico en el suelo en un sedimento corresponde mayor valor de K_d , por lo tanto, existe una proporción lineal con el grado de hidrofobia del soluto que se le mide por el coeficiente de partición octanol/agua, K_{ow} , siempre que el contenido de carbono orgánico sea mayor de 0.1 por ciento (Karickhoff *et al*, 1979).

Dispersión

Para entender mejor el termino de dispersión, considérese el sistema de agua subterránea como el flujo a través de tubos. El efecto más importante de la dispersión es la expansión de materia más allá de la región normalmente ocupada debida sólo a la advección. Ésto se puede ilustrar con una columna por la cual se hace pasar un fluido con un bombeo controlado y continuo, adicionando un trazador al agua. Se inicia con un flujo estable a través de la columna y la prueba inicia con un trazador con una concentración relativa de $C/C_0 = 1$ añadiendo una concentración constante a intervalos de tiempo controlados. El monitoreo a la salida de la columna determinará la concentración relativa del trazador como una función del tiempo.

La siguiente figura muestra la variación del trazador entrando y saliendo de la columna. Estas concentraciones relativas con relación al tiempo de distribución son conocidos como la función de carga y la curva con un punto de quiebre respectivamente. La curva con el punto de quiebre no tiene el mismo camino que la función de carga. La dispersión crea una zona de mezclado entre el fluido desplazado y el fluido que esta siendo desplazado la cual está definida como el producto de la velocidad lineal y el tiempo desde el inicio de la prueba.

Una zona de mezclado gradual se desarrolla alrededor de la posición del frente advectivo. El tamaño de la zona de mezclado se incrementa con el movimiento advectivo que va más allá de la fuente (Domenico y Schwartz, 1990).

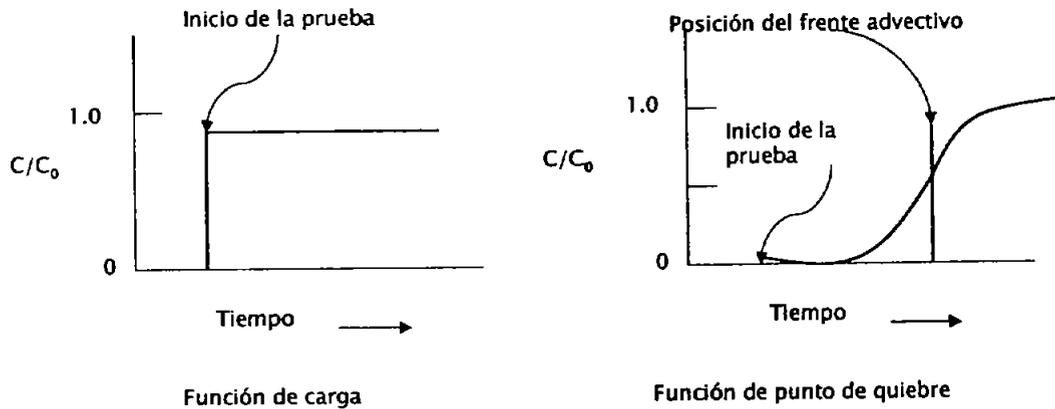


Figura 3.2 Experimento de la columna de Dispersión

Gradiente hidráulico

Al considerar los puntos A y B a lo largo de una corriente subterránea, con sus respectivas cargas hidráulicas H_a y H_b , se dice que el gradiente hidráulico en la dirección A-B es

$$i = \frac{H_b - H_a}{L} \tag{Ec. 4}$$

donde L es la distancia entre los punto A y B.

El gradiente se considera negativo si se toma en la dirección del flujo.

La fuerza impulsora del flujo del agua subterránea es el potencial o carga hidráulica; cuando el fluido tiene la misma carga en cualquier punto, no hay movimiento; cuando existe una diferencia de carga, el agua fluye en la dirección en que disminuye la carga si se considera que

$$P_i = \rho_g (h_i - z_i) \tag{Ec. 5}$$



$$h_i = \frac{P_i}{\rho g} + Z_i \quad (\text{Ec. 6})$$

donde:

P presión (ML⁻²)

ρ densidad (ML⁻³)

g aceleración (LT⁻²)

h_i carga hidráulica en el punto i, dada por el nivel en el piezómetro (L)

z_i carga de posición considerando un nivel de referencia (L)

De acuerdo con la ecuación de Bernoulli, a lo largo de una línea de corriente

$$\frac{P_i}{\rho g} + Z_i = \frac{P_2}{\rho g} + Z_2 + \Delta h \quad (\text{Ec. 7})$$

de manera que la pérdida de carga hidráulica Δh es igual a la diferencia de los niveles de agua h₁ - h₂.

Para la determinación de la carga hidráulica se utiliza un piezómetro abierto al flujo de agua en la parte inferior y a la atmósfera en la parte superior. Los piezómetros se instalan por lo general en grupos con el propósito de calcular la dirección del flujo de agua subterránea.

Porosidad

Los espacios no ocupados por material sólido pueden llenarse con agua y aire o únicamente con agua si el suelo está saturado, estos espacios se conocen como intersticios o poros y a través de ellos fluye el agua subterránea.

La porosidad en el suelo, n es la medida de los poros que éste contiene y se expresa como la volumen de vacíos, V_v, entre el volumen total, V_t.

$$n = \frac{V_v}{V_t} * 100 \quad (\text{Ec. 8})$$

La porosidad de un suelo depende del arreglo y forma de las partículas del suelo, así como de su distribución por tamaño y grado de compactación.



Permeabilidad

La permeabilidad es la capacidad de una roca de transmitir agua. En un acuífero, es la resistencia al flujo de agua subterránea a través de los poros, de los cuales la permeabilidad puede ser considerada como una medida. En algunos casos es una función de la porosidad, tamaño de partícula, distribución, orientación y arreglo de las partículas (Bowen, 1980).

3.2 Evaluación de riesgo

3.2.1 Exposición a compuestos químicos

Sin datos de exposición adecuados es virtualmente imposible hacer una estimación confiable de daños potenciales a la salud humana y no humana, atribuible a la presencia de compuestos químicos en el ambiente.

La exposición a compuestos químicos se define usualmente como la concentración de estos a superficies externas o internas en el organismo. La definición tiene simplicidad. Sin embargo, el contacto entre los químicos y el organismo, el cual determina el efecto, es más complejo que esta definición. Como la exposición siempre involucra tiempo, de forma explícita o implícita, la siguiente definición es más apropiada:

La exposición a un contaminante dado es una medida del contacto entre el contaminante y la superficie exterior o interior (superficie alveolar) del cuerpo humano. Ésto es usualmente expresado en términos de concentración de contaminantes en la interfase del medio (aire o alimento) con la superficie del cuerpo. Una vez absorbida a través de la superficie, el contaminante dado aumenta en varios órganos o tejidos. Las dosis son medidas en términos de concentraciones en los tejidos. La relaciones de exposición y dosis deben incluir una indicación de tiempo y frecuencia.

Para el hombre y mamíferos terrestres, la interfase importante entre los organismos y el ambiente son la piel y el epitelio del tracto respiratorio y digestivo; para los peces el tracto digestivo y branquias; para las plantas terrestres, la superficie de las hojas y la raíz; para las plantas acuáticas el tallo y las hojas.



3.2.2 Identificación y evaluación de las fuentes de compuestos químicos

La evaluación a la exposición inicia con la examinación del ingreso de un compuesto químico al medio ambiente y éste involucra la identificación, descripción cualitativa y cuantitativa de las fuentes de los compuestos químicos. Para problemas locales, la cantidad involucrada es muy importante. Si la contaminación está ampliamente extendida, el análisis requiere consideraciones químicas y físicas de las sustancias, cantidad total, modelos de distribución, uso y disposición.

La cantidad producida de sustancias global o local no es fácil de obtener en una región geográfica determinada. Además la producción de compuestos de síntesis orgánica que son altamente tóxicos no son producidos de manera deliberada, sin embargo, ocurre frecuentemente que éstos son impurezas de productos más o menos inocuos (Bennett *et al.*, 1985).

Las fuentes de sustancias contaminantes también pueden ser naturales y son liberadas cuando tales fuentes son explotadas. Por ejemplo la principal fuente de contaminación ambiental por mercurio relacionada con la actividad humana es la combustión de combustibles fósiles los cuales generalmente contienen mercurio como impureza en concentraciones de menos de una parte por millón.

Otro problema es predecir el estado físico y químico en el cual la sustancia puede estar liberada. Los vapores liberados de algunos compuestos orgánicos pueden estar relacionados al transporte de partículas muy finas a grandes distancias.

3.2.3 Evaluación de riesgo a la salud

Es importante conocer el nivel de riesgo a que se encuentran los trabajadores de las instalaciones que se estudian, así como el de la población vecina, y de esta manera obtener la información necesaria que permita llevar a cabo las acciones pertinentes para dar solución a los problemas de contaminación por hidrocarburos, y en el caso particular de este trabajo, a los ocasionados por metales y disolventes orgánicos.

La evaluación de riesgo se define como el proceso que estima la probabilidad de ocurrencia de daño al ser humano como consecuencia de su exposición a sustancias tóxicas (NRC, 1983).

El producto final de esta evaluación es un número adimensional que en el caso de compuestos carcinógenos refleja la probabilidad de que un individuo desarrolle cáncer. Para este tipo de compuestos la U.S.EPA (Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos de América) ha establecido como riesgo aceptable un intervalo de probabilidad de entre 1×10^{-4} a 1×10^{-6} . Tradicionalmente se ha considerado a 1×10^{-6} como el valor más aceptado; sin embargo, se ha visto que este valor equivale en la práctica a un riesgo cero, y que los riesgos de fondo de adquirir cáncer por otras vías diferentes a la exposición a sitios contaminados (consumo de alimentos procesados, por ejemplo) superan este valor. Por ello, en la actualidad la misma U.S.EPA está proponiendo cada vez en mayor medida para sitios Superfund, concentraciones de limpieza basados en valores de riesgo de 1×10^{-4} ó 1×10^{-5} (1×10^{-4} a 1×10^{-6})

Para compuestos no carcinógenos, el riesgo se entiende como un cociente de peligrosidad (HQ), el cual es el resultado de dividir la dosis de un compuesto tóxico a la que está expuesto el individuo entre la dosis de referencia (RfD) para la que se sabe que es poco probable que se desarrollen los efectos adversos asociados a ese compuesto tóxico de interés. La U.S.EPA establece como aceptable un HQ de 1, que indica que la dosis de compuesto químico recibida por el individuo expuesto no excede a la dosis de referencia establecida como aceptable por los toxicólogos. Así mismo, los valores de HQ para diferentes sustancias y/o vías de exposición pueden sumarse para obtener el índice de peligrosidad (HI); de la misma forma, que el factor de riesgo total para un medio (agua, suelo, aire) es la suma de los factores de riesgo individuales de cada contaminante detectado en dicho medio. La U.S.EPA, considera aceptable un HI de 1, puesto que establece la aditividad de efectos en los compuestos no carcinógenos.

Si se exceden los valores antes mencionados de riesgo y de HQ (o HI), se establece que la población expuesta está en riesgo.

Para determinar la carcinogenicidad de un compuesto, la U.S.EPA clasifica a los compuestos en una de cinco categorías, de acuerdo con las evidencias toxicológicas es la siguiente (Moore, 1992):

- A Carcinógeno para humanos: evidencias epidemiológicas.
- B1 Probablemente carcinógeno: evidencia en más de dos especies animales y con evidencia limitada en humanos.

B2 Probablemente carcinógeno: evidencia en más de dos especies animales, pero sin evidencias o evidencias inadecuadas en humanos.

C Posible carcinógeno para humanos: evidencia en una especie de animal y sin evidencias en humanos.

D No clasificable como carcinógeno para humanos: sin evidencia o evidencia inadecuada de carcinogenicidad en humanos o animales.

E Evidencias de que no produce cáncer en humanos: resultados negativos en pruebas de cáncer en más de dos especies de animales diferentes.

Para el caso de compuestos carcinógenos, el riesgo se define como:

$$\text{Riesgo} = (\text{Dosis de exposición a lo largo de la vida}) \times (SF)$$

Donde la dosis de exposición a lo largo de la vida, es la cantidad de contaminante que ingresa al organismo de un individuo a lo largo de la vida, por unidad de peso corporal por día, a través de las diferentes vías de exposición (ingestión, inhalación o contacto dérmico) y se expresa en mg/kg/d; esta dosis depende de los parámetros de exposición (tasa de ingestión, peso corporal, etc) y la concentración en punto de contacto entre el individuo y el contaminante. El SF (factor de la pendiente de cáncer) es un valor que expresa la potencia de la sustancia química para producir cáncer. Como su nombre lo indica, es la pendiente de la curva dosis respuesta que relaciona una ingesta o exposición ambiental dada a un riesgo de adquirir cáncer superior a la normalidad (casos esperados por dosis recibida); se expresa en unidades de (mg/kg/d)⁻¹.

Para el caso de compuestos no carcinógenos, el riesgo se define como:

$$\text{Cociente de peligrosidad (HQ)} = \text{Dosis de exposición promedio} / \text{RfD}$$

Donde la dosis de exposición promedio es la cantidad de contaminante que ingresa al organismo del individuo durante el tiempo que dura la exposición (mg/kg/d) y la dosis de referencia (RfD) es una estimación de la exposición diaria (mg/kg/d) a la que la población general humana (incluyendo grupos sensibles) puede ser expuesta a lo largo de la vida sin un riesgo apreciable de que se presenten efectos adversos a la salud. La dosis de exposición depende de las condiciones de exposición (tasa de ingestión, duración de la exposición, etc.) y la concentración en el punto de contacto entre el individuo y el contaminante.



Algunas sustancias químicas pueden tener tanto efectos carcinógenos como no carcinógenos, por lo que pueden existir para un compuesto en particular, tanto dosis de referencia (RfD) como factores de la pendiente de cáncer (SF) (U.S.EPA, 1997).

La vía de exposición es la forma en que el agente químico establece contacto con el organismo (por ingestión, inhalación o contacto dérmico) y la ruta de exposición, es el mecanismo que sigue el contaminante para llegar al individuo a partir de la fuente de contaminación (volatilización, erosión, dispersión, lixiviación, etc.).

De igual manera con la evaluación de riesgo a la salud es posible conocer la concentración que se debe tener en los medios afectados (suelo y agua subterránea) de tal forma que no se rebase el riesgo establecido como aceptable, y de esta forma se establecen los niveles de limpieza basados en riesgo (se reduce la concentración del contaminante hasta un valor que asegure un riesgo HQ o HI aceptables).

3.2.4 El modelo RBCA (Risk Based Corrective Action)

Es RBCA (Risk Based Corrective Action) un marco de trabajo desarrollado por el ASTM (American Society of Testing and Materials) para realizar las evaluaciones de riesgo a la salud. El modelo RBCA aplica las ecuaciones de riesgo genéricas establecidas por la comunidad científica dedicada a las evaluaciones de riesgo, y las integra dentro de un esquema de evaluación por niveles, que considera al mismo tiempo los procesos de transporte, mecanismos de atenuación y la aplicación de valores específicos de exposición.

Los niveles de evaluación considerados por ASTM dentro de RBCA son tres:

- ◆ En el nivel 1, RBCA considera el panorama de exposición más dramático, donde la población expuesta se encuentra sobre la fuente de exposición y los valores de exposición son los más restrictivos.
- ◆ En el nivel 2, se considera el panorama donde la población expuesta se encuentra alejada de la fuente de contaminación, como sucede en la mayoría de los casos, donde además de los trabajadores o habitantes que



se encuentran en la fuente, se tienen pobladores cercanos. Así mismo considera condiciones de sitios específicas (como porosidad del suelo, densidad, etc.). En estos dos niveles los valores de las variables involucradas son puntuales (media, media geométrica, percentil 95)

- ♦ En el nivel 3, ASTM considera la creación de distribuciones de probabilidad de los parámetros de interés para obtener los valores más probables de riesgo o HQ, puesto que este nivel de evaluación requiere de mucha información y un manejo de ésta más especializado, ASTM establece que deben ser las instituciones gubernamentales las que apliquen directamente este tipo de evaluación.

Dentro del modelo RBCA se parte de un modelo conceptual que refleja el panorama de exposición e implica el seguimiento del contaminante desde la fuente hasta el receptor (ruta de exposición, mecanismos de transporte y vías de exposición).

Finalmente se obtiene el riesgo asociado a los contaminantes y las condiciones de exposición propias del sitio, así como las concentraciones que deben tenerse en los medios afectados para cumplir el riesgo establecido como aceptable. Es importante resaltar que bajo este esquema, si no existe exposición (ya sea por una ruta de exposición incompleta o por la ausencia de receptores) no hay riesgo, y puede establecerse un plan de manejo del sitio que permita evitar o reducir la exposición a fin de que el riesgo se disminuya hasta valores aceptables.

Para evaluación de riesgo del predio en estudio se aplicó el nivel 2, debido a que se consideraron las condiciones de exposición y geohidrología específicas del sitio para evaluar el riesgo de los trabajadores de la refinería y la población vecina. Para ello se usó el programa denominado RBCA Tool Kit for Chemical Release v.1.3, desarrollado por GSI (2000), que es un programa en el que se integran las ecuaciones de riesgo y los modelos de transporte establecidos por ASTM.

3.2.5 Ecuaciones empleadas en el modelo de Riesgo a la salud RBCA

La ecuación que corresponde a la obtención de la concentración en suelo por ingestión, inhalación y contacto dérmico para Riesgo Cancerígeno es:

$$C1 = \frac{TR \times BW \times AT_c \times 365 \text{ días/año}}{EF \times ED \times \left[\left(SF_o \times 10^{-6} \times (IR_s \times RAF_o + SA \times M \times RAF_d) \right) + \left(SF_i \times IR_{air} \times (VF + VFP) \right) \right]} \quad (\text{Ec. 9})$$

La ecuación para obtener la concentración en suelo por ingestión, Inhalación y contacto dérmico para Riesgo No Cancerígeno es:

$$C2 = \frac{THQ \times BW \times AT_n \times 365 \text{ días/año}}{EF \times ED \times \left[\left(10^{-6} \times \frac{IR_s \times RAF_o + SA \times M \times RAF_d}{RfD_o} \right) + \left(\frac{IR_{air} \times (VF + VFP)}{RfD_i} \right) \right]} \quad (\text{Ec. 10})$$

Las ecuaciones para la concentración en suelo por ingestión de agua contaminada por lixiviación del suelo son las siguientes:

Riesgo Cancerígeno

$$C3 = \frac{TR \times BW \times AT_c \times 365 \text{ días/año}}{SF_o \times IR_w \times EF \times ED \times LF} \quad (\text{Ec. 11})$$

Riesgo No Cancerígeno

$$C4 = \frac{RfD_o \times THQ \times BW \times AT_c \times 365 \text{ días/año}}{IR_w \times EF \times ED \times LF} \quad (\text{Ec. 12})$$

Las ecuaciones anteriores requieren de los factores de volatilización de suelo superficial al aire, factor de emisión de partículas, lixiviación del suelo al agua subterránea.

Factor de volatilización de suelo superficial al aire.

$$VF = \frac{2 \times W \times \rho_s}{U_{air} \times \delta_{air}} \sqrt{\frac{D_s^{eff} \times H}{\pi \times r \times \left(\theta_{ws} + K_s \rho_s + H \theta_{as} \right)}} \times 10^3 \quad (\text{Ec. 13})$$

Factor de emisión de partículas.

$$VFP = \frac{P_e \times W}{U_{air} \times \delta_{air}} \times 10^3 \quad (\text{Ec. 14})$$

Factor de lixiviación del suelo al agua subterránea.

$$LF = \left(\frac{\rho_s \times L_1}{\theta_{ws} + K_s \rho_s + H\theta_{as}} \right) \times L_2 \quad (\text{Ec. 15})$$

Difusividad efectiva en la zona no saturada.

$$D_s^{eff} = D^{air} \frac{\theta_{as}^{3.33}}{\theta_T^2} + \left(\frac{D^{wat}}{H} \right) \left(\frac{\theta_{ws}^{3.33}}{\theta_T^2} \right) \quad (\text{Ec. 16})$$

Donde:

Parámetro	Descripción	Unidades
AT _c	Tiempo promedio carcinógenos	Años
AT _n	Tiempo promedio no carcinógenos	Años
BW	Peso corporal	Kg
D _{air}	Coeficiente de difusión en aire	cm ² /s
D _s ^{eff}	Difusividad efectiva en la zona no saturada	cm ² /s
D _{wat}	Coeficiente de difusión en agua	cm ² /s
ED	Duración de exposición	Años
EF	Frecuencia de exposición	d/años
H	Constante de la ley de Henry	(cm ³ /H ₂ O)/(cm ³ -aire) adimensional
IR _{air}	Tasa de ventilación pulmonar	m ³ /día
IR _s	Tasa de ingestión de suelo	kg/d
IR _w	Tasa de ingestión de agua	L/d
K _s	Coeficiente de distribución suelo-agua	(cm ³ /H ₂ O)/(g-suelo)
LF	Factor de lixiviación agua subterránea-suelo	(mg/L-agua)/ (mg/kg-suelo)
L ₁	Espesor contaminado del suelo	M
L ₂	Profundidad del nivel freático	M

Parámetro	Descripción	Unidades
M	Factor de adherencia suelo-piel	(mg/cm ² .d)
Pe	Tasa de emisión de partículas	g/ cm ² .s
RAF _d	Factor relativo de absorción para contacto dérmico de suelo	adimensional
RAF _o	Factor relativo de absorción oral	adimensional
RfDi	Dosis de referencia de inhalación	mg/kg.día
RfD _o	Dosis de referencia oral	mg/kg.día
SA	Área superficial de piel para contacto dérmico	cm ²
Sfi	Factor de pendiente de inhalación	(mg/kg.d) ⁻¹
Sfo	Factor de pendiente de oral	(mg/kg.d) ⁻¹
THQ	Cociente de peligrosidad permisible	adimensional
TR	Riesgo permisible	adimensional
U _{air}	Velocidad del viento en la zona de mezclado del aire	cm/s
VF	Factor de volatilización suelo superficial a aire	(mg/m ³ -aire)/ (mg/kg-suelo)
VFP	Factor de emisión de partículas	(mg/m ³ -aire)/ (mg/kg-suelo)
W	Ancho del área fuente paralela a la dirección del viento o el agua subterránea	Cm
δ _{air}	Altura de zona de mezclado del aire	Cm
π	<i>Valor numérico= 3.1416</i>	
	Contenido volumétrico de aire en la zona vadosa	cm ³ -aire/ cm ³ -suelo
	Porosidad total del suelo	cm ³ / cm ³
	Contenido volumétrico de agua en la zona vadosa	cm ³ / cm ³
ρ _s	Densidad aparente del suelo	g/cm ³
τ	Tiempo promedio para flujo de vapor	seg.



Dentro de los parámetros requeridos por el modelo RBCA (Risk Based Corrective Action) se encuentran algunas propiedades fisicoquímicas de las sustancias en estudio y están son la solubilidad, presión de vapor, constante de Henry, coeficiente de difusión, coeficiente de distribución octanol-agua, coeficiente de distribución agua-suelo y el factor de bioacumulación.

A continuación se define de manera breve estas propiedades:

Solubilidad: Es el grado en que una sustancia, el soluto, se disuelve en otra, el disolvente. La solubilidad de las sustancias químicas en agua esta en función de la temperatura y del tipo de contaminante.

Presión de vapor: la presión de vapor del contaminante, es la presión de la fase gas en equilibrio con la fase líquida o sólida, es un índice del grado en que el contaminante se pueda evaporar.

Constante de Henry: La ley de Henry se emplea para describir el grado de solubilidad de un gas en un líquido. Esta ley afirma que en condiciones de equilibrio la presión parcial inmediatamente superior a un líquido es proporcional a la concentración de esa sustancia en el líquido.

Coefficiente de difusión: Las sustancias químicas presentes en la atmósfera y en el agua tienden a trasladarse desde áreas de mayor a menor concentración. La difusión puede definirse como el movimiento de una sustancia bajo la influencia de un gradiente de concentración.

Coefficiente de distribución octanol-agua K_{ow} : es una constante adimensional con la que se mide el grado de distribución de una sustancia orgánica entre la fase orgánica y el agua.

Coefficiente de distribución suelo-líquido K_d : sirve para medir la capacidad de una sustancia química de ser adsorbida por el suelo o por los sedimentos, y es la relación entre la concentración en el suelo y la concentración en el agua.

Factor de bioacumulación: muestra la cantidad de sustancia química susceptible de acumularse en los organismos acuáticos. Y depende del metabolismo y de los sistemas de eliminación del organismo (LaGrega *et al.*, 1994).



3.3 Toxicidad de los compuestos estudiados

3.3.1 Toxicidad del Benceno

El benceno es ampliamente usado en la industria de los disolventes, como intermediario en síntesis química y como componente de las gasolinas, por lo tanto, la exposición humana a dicho compuesto es grande.

La inhalación es la principal ruta de exposición al benceno, además de las rutas oral y dérmica que también son importantes. La cinética (absorción, distribución, metabolismo y eliminación) de benceno ha sido estudiada en humanos y en algunas especies de animales. El benceno se absorbe fácilmente por humanos y animales y se distribuye entre varias partes del cuerpo. El compuesto tiene preferencia en almacenarse en la grasa que existe en el cuerpo.

Los estudios demuestran que el 95% de dosis orales pueden ser absorbida por animales y el 80% de benceno inhalado puede ser absorbido por humanos después de 5 minutos de exposición.

Los humanos pueden absorber vapores de benceno a través de la piel así como los pulmones, del total de la dosis absorbida por estas dos vías, se estima que entre un 22-36% entra al cuerpo a través de la piel.

El benceno puede tener efectos a largo plazo en el sistema nervioso central. Los trabajadores expuestos a benceno de 0.5 a 5 años exhiben cambios atípicos para dormir con neurotoxicidad. Otras dosis de exposición que van de las concentraciones de 210 ppm de 6 a 8 años causan daño al sistema nervioso periférico.

El benceno es carcinogénico en humanos y animales por inhalación y en animales por ruta de exposición oral. La exposición ocupacional ha sido asociada principalmente con la incidencia de problemas en la producción de sangre, anemias, hemorragias internas y leucemias (IRIS, 2003a; RAIS, 2003e).

3.3.2 Toxicidad del Tolueno

El tolueno es un líquido incoloro ampliamente usado en la producción de compuestos orgánicos y como disolvente. Este es absorbido por las vías gastrointestinal y respiratoria y en menor grado a través de la piel. El tolueno se distribuye a través del cuerpo, con acumulación en los tejidos con alto contenido

de lípidos. Este es metabolizado en el hígado a ácido hipúrico y glucoronido, compuestos que pueden ser fácilmente eliminados por las vías urinarias. En humanos y animales, el efecto primario asociado con la inhalación a tolueno es depresión del sistema nervioso central. De la exposición por periodos cortos de humanos a 100–1500 ppm se han obtenido efectos como fatiga, confusión, coordinación, percepción y la función y control del sistema motor. La exposición a concentraciones de 10,000–30,000 ppm tienen como resultado narcosis y la muerte. La exposición a tolueno en periodos de tiempo prolongados a mezclas de disolventes que contienen tolueno conducen a efectos permanentes en el sistema nervioso central. La exposición a concentraciones altas de tolueno (1500ppm), ha producido la pérdida del oído en ratas. Se han reportado Hepatomegalia y daños a las funciones del hígado y riñones en algunos humanos expuestos a tolueno así como en periodos prolongados y repetido contacto dérmico puede causar resequedad de la piel y dermatitis. Los vapores de tolueno pueden causar la irritación de los ojos. (RAIS, 2003d)

3.3.3 Toxicidad del Vanadio

El vanadio es un elemento metálico que tiene seis estados de oxidación y numerosos compuestos inorgánicos. Algunos de los más importantes son el pentóxido de vanadio (V_2O_5), metavanadato de sodio ($NaVO_3$), ortovanadato de sodio (Na_3VO_4) entre otros. El vanadio es usado principalmente como un agente de aleación en metales no férricos y aceros. Los compuestos de vanadio son también usados como catalizadores en químicos y aplicaciones especiales como en cerámica.

Los compuestos de vanadio son absorbidos muy poco por al vía gastrointestinal, sin embargo, se absorben mayormente por los pulmones 20–25%. El vanadio absorbido se distribuye ampliamente en el cuerpo, pero su localización en tiempos cortos es principalmente en huesos, hígado y riñones. En el cuerpo el vanadio puede experimentar cambios en el estado de oxidación (interconversión de las formas V^{+4} y V^{+5}) y puede también unirse a una proteína de la sangre.

La toxicidad del vanadio depende de su estado fisicoquímico, y particularmente de su estado de oxidación (valencia) y de la solubilidad. El pentavalente NH_4VO_3 ha sido reportado como el más tóxico así como el trivalente VCl_3 y seis veces más tóxico como divalente VI_2 . El pentavalente V_2O_5 ha sido reportado cinco veces más tóxico que V_2O_3 . En animales la toxicidad aguda de dosis orales causa vasoconstricción, enteritis difusa, congestión y degeneración adiposa del hígado,

congestión y hemorragia focal en pulmones. Se han visto efectos mínimos en exposiciones orales subcrónicas; en animales se presentan efectos como diarrea, alteraciones de la función renal y disminución en la cuenta eritrocitos, hemoglobina y hematrocitos. En humanos puede causar dolores intestinales y diarrea. Los estudios indican que para exposiciones crónicas y subcrónicas los principales blancos son el sistema digestivo, riñones y sangre (RAIS, 2003c).

3.3.4 Toxicidad de Hierro

El hierro es un elemento esencial para el desarrollo de los organismos; no se considera peligroso, no se tienen factores dependientes del cáncer. No obstante se han encontrado algunas dosis de referencia y la información toxicológica que a continuación se menciona. Produce anorexia, diarrea, hipotermia, acidosis metabólica, congestión vascular del tracto gastrointestinal, riñones, hígado, impotencia, amenorrea. Provoca la muerte en niños de 2 años cuando ingieren 3 gramos de hierro y una dosis de 1 gramo produce envenenamiento severo (Cornell,1999).



Capítulo 4

METODOLOGÍA

4. 1 Muestreo de Suelo y de Agua Subterránea

La selección de la ubicación de los puntos de muestreo del subsuelo se realizó mediante un receptor de señales vía satélite, tipo GPS 12 marca Garmin.

Se perforaron 364 puntos en el subsuelo a una profundidad variable entre 0.70 y 2.50 m. En los casos en los que la contaminación era evidente se tomó un perfil entre 0.80 y 2.280 m.

Para el muestreo de suelo se utilizaron cuatro equipos de perforación: dos portátiles y dos neumáticos.

El equipo semiportátil consta de un tripié, un tubo pistón o martinete, un tubo espiga o golpeador y un tubo muestreador con zapata.

El tripié tiene tres secciones de tubos mecánicos de 10 cm de diámetro. Cada sección, a su vez, cuenta con tres tubos mecánicos que se acoplan: dos de 1.5 m y uno de 2.0 m de longitud. El equipo instalado tiene una altura de 3.9 m.

El tubo pistón o martinete consta de dos secciones de tubos mecánicos de 10 cm de diámetro y 1.10 m de longitud, que tiene rosca en uno de sus extremos para acoplar el émbolo que golpea al tubo espiga. En el otro extremo cuenta con una polea de 12.7 cm de abertura y 1.9 cm ($3/4$ ") de espesor que sirve para subir y bajar el martinete.

El equipo de perforación neumático tiene un motor de 12 Hp y una velocidad variable de perforación. Para el muestreo, utiliza un martinete igual al del equipo semiportátil, que se instala a través de un sistema de poleas. El muestreador es el mismo que el del equipo portátil.

El equipo de perforación portátil se usó en los puntos en que no hay concreto en la superficie del terreno.

El procedimiento consistió en perforar hasta la profundidad requerida con el equipo de perforación, posteriormente se extrajo el tubo de perforación y se instaló el tubo muestreador, se obtuvo la muestra, se extrajo el tubo con la muestra, se corto y sello en ambos extremos. Se etiquetó y se almacenó a 4°C hasta el momento de su análisis.

La instalación de 54 piezómetros se realizó de la siguiente manera: 26 piezómetros se instalaron para pruebas con trazadores en Patio Norte, a fin de verificar la dirección del flujo del agua subterránea, 20 en la zona de Refinación y 8 en las calles exteriores a la refinería. El número asignado a cada piezómetro corresponde al número del punto de muestreo de suelo ya que en cada sitio donde se ubicó un piezómetro también se obtuvo muestra de suelo.

Las perforaciones para la instalación de los piezómetros se realizó con un equipo Longyear 34, el cual se instala sobre un camión. El equipo cuenta con un motor Ford Diesel de 435 Hp de potencia a 1800 rpm y una fuerza de 850 kg. Para la perforación inicial en concreto y/o roca utiliza una broca con punta de diamante de 5" de diámetro. Para la perforación del suelo utiliza una broca helicoidal de 4" de diámetro igual a las que se utiliza el equipo de 12 Hp.

La perforación de los piezómetro se llevo a cabo a 4 m de profundidad, con instalación de ademe para evitar la caída de la arena de las paredes en la perforación, en la cual posteriormente se instaló un tubo de PVC ranurado a partir de 1m de profundidad.

Entre el tubo y el ademe se colocó gravilla entre el primer metro de profundidad y los 4 m, para facilitar la entrada del agua subterránea al piezómetro y en el primer metro a partir de la superficie se agregó cemento para sellar la parte superior. En la parte superior a nivel del suelo se instaló un tapa metálica para facilitar el monitoreo de agua subterránea.

Durante el muestreo de suelo se tomaron muestras para determinar el tipo de suelo, porosidad, densidad aparente y contenido de carbono orgánico. De acuerdo con los análisis realizados el tipo de suelo es arena mal graduada, de acuerdo con el Sistema Unificado de Clasificación de Suelos (SUCS).

4.2 Metodología

- ❖ Se seleccionaron los contaminantes para obtener la pluma de dispersión y la evaluación de riesgo del sitio estudiado y estos fueron: benceno, tolueno, hierro y vanadio.
- ❖ Se elaboró una base de datos del sitio seleccionado para aplicar el modelo geohidrológico Modflow y se recopiló la información necesaria para obtener la pluma de dispersión.
- ❖ Se obtuvo la pluma de dispersión para cada contaminante seleccionado con el modelo Modflow.
- ❖ Los resultados del Modflow dieron la longitud y ancho de la pluma contaminante con las concentraciones de los compuestos problema. Estos datos se emplearon como información en el modelo RBCA.
- ❖ Debido a los contaminantes presentes en el suelo, se aplicó una evaluación de riesgo a la salud que contempla las posibles vías de exposición: ingestión del suelo contaminado, contacto dérmico del suelo, inhalación de vapores y partículas de polvo.
- ❖ De los compuestos que la ASTM establece de interés para sitios contaminados con hidrocarburos (ASTM, 1996) se consideró para la presente evaluación de



riesgo a la salud el benceno y el tolueno que forman parte de los BTEX (Benceno, tolueno, etilbenceno y xileno).

- ❖ Además se consideraron los metales; hierro y vanadio, que son dos de los metales que durante el muestreo del área problema se encontraron en concentraciones mayores.

4.3 Selección de los contaminantes a evaluar

La información del sitio en estudio considera varios contaminantes entre los que se encuentran: antraceno, benceno, benzo(a)pireno, benzo(k)fluoranteno, cadmio, etilbenceno, fenantreno, fluoreno, hierro, metiliterbutileter, naftaleno, pireno, plomo, tolueno, vanadio, xileno y zinc.

De acuerdo con los estudios previos realizados y la información geohidrológica así como las concentraciones de los diferentes contaminantes, se observó que el hierro representa concentraciones altas, como por ejemplo de 174.4 mg/l en agua, principalmente en algunas partes del predio de la refinería.

Además de ser un metal no biodegradable, tiene un comportamiento que causó gran interés. En los datos de monitoreo de hierro en agua subterránea se observa que en la mayoría de los puntos de muestreo la concentración de hierro aumenta, en el agua, esto no ocurrió así en todos los casos ya que la concentración disminuye considerablemente como sucedió en el *punto 12* que en 1999 era de 174.4 mg/l y en diciembre del 2002 llega hasta 4.29 mg/l, o en el *punto 240* de 11.044 mg/l a 0.74mg/l, este comportamiento puede ser debido a que el hierro migró en la dirección de flujo.

Sin embargo, con respecto a los demás datos la concentración aumenta probablemente a que ahora el hierro avanzó en sentido vertical es decir, pasó del suelo al agua, por lo que ahora se encontró mayor concentración en agua, principalmente en el *piezómetro 1* que aumenta de 61 a 140mg/L en el 2002 (Iturbe *et al.*, 2000, 2002).

Por esta razón se decidió obtener la pluma de dispersión para este metal, así como para el vanadio debido a que también presentó altas concentraciones, como



en el punto 133 donde se tiene una concentración de 658.61 mg/kg así como también cerca del patio de tanques, es decir que éste además de ser un elemento tóxico tiene un comportamiento similar en cuanto al fenómeno de transporte en el sitio en estudio.

La fuente de hierro del sitio en estudio puede deberse al almacenamiento de chatarra que se llevó a cabo desde hace más de 50 años en la zona y la presencia de tiraderos industriales.

En el caso de los aromáticos se eligió al benceno, por su toxicidad ya que se encontró en 4 zonas con valores altos de concentración como por ejemplo en el punto 73 con 2.51 mg/l y hasta de 5.15 mg/l en agua subterránea.

El tolueno es otro de los que se consideró importante para obtener la pluma de migración y el riesgo porque también se observaron algunos puntos de muestreo con concentraciones altas de este compuesto.

4.4 Modelo geohidrológico Visual Modflow

El modelo hidrogeológico visual Modflow realiza la simulación numérica. Es capaz de simular acuíferos confinados, semiconfinados y libres. Este programa simula el flujo en la zona saturada cuando el agua tiene la misma temperatura y densidad.

El programa esta formado por varios paquetes que son utilizados para resolver las ecuaciones de las diferencias finitas de manera que el usuario tiene control sobre el método de solución utilizado. Además, estos paquetes permiten resolver condiciones de frontera específicas como drenes, ríos, recarga, evapotranspiración, entre otros. (Guiguer, N. *et al.*, 1999)

En la calibración del modelo, varias secciones, incluyendo los valores de entrada se intercambian por los valores medidos, llamados frecuentemente observaciones, los cuales forman parte de los valores simultáneos equivalentes utilizados en el modelo.

Los valores de entrada que necesitan ser estimados son distribuidos en espacio y tiempo, así que el número de parámetros puede ser infinito. Sin embargo, el número de observaciones es limitado y capaz de soportar la estimación de pocos valores de entrada.

Generalmente se introduce un número de suposiciones que permiten estimar un número limitado de valores y éstos son usados para definir un modelo selecto en el espacio y tiempo. En este trabajo el término "parámetro" está reservado para valores usados para caracterizar el modelo de entrada. Es posible que algunos métodos, tales como los descritos permitan estimar más parámetros.

Los métodos formales que han sido desarrollados intentan estimar valores de parámetros dando lugar a un proceso descrito matemáticamente y un número de observaciones relevantes. Estos modelos son llamados inversos, por lo cual están limitados a la estimación de los parámetros descritos. Por lo tanto, "estimación de parámetros" y "modelo inverso" son sinónimos en este caso.

Para algunos casos el problema inverso es lineal, por lo cual las cantidades observadas son funciones lineales de los parámetros. En muchas circunstancias de interés práctico, el problema inverso no es lineal, y la solución es menos sencilla que el problema lineal.

4.4.1 Modpath

Modpath es el paquete con el cual se calculó las trayectorias en tres dimensiones usando las salidas del estado estable o del flujo de agua subterránea simuladas por Modflow, the U.S. Geological Survey, modelo para agua subterránea de diferencias finitas.

El paquete está programado en Fortran, Modpath, es el que realiza el cálculo de las trayectorias de la partícula y Modpath-Plot despliega los resultados gráficamente.

4.4.2 Visual Modflow

Visual Modflow estandarizado y probado en aguas subterráneas, ha sido diseñado específicamente para aumentar la productividad y disminuir la complejidad típica asociada a la dirección del flujo de agua subterránea en tres dimensiones y los modelos de transporte de contaminantes. La interfase está dividida en tres módulos:

- El módulo de entrada (The Input model)

- El módulo de la simulación (The run model)
- El módulo de salida (The output model)

Cuando el archivo es creado o abierto es posible cambiar entre estos módulos para construir o modificar los parámetros del modelo de entrada, correr la simulación y desplegar los resultados .

Cada modulo de interfase de Visual Modflow tiene la misma pantalla básica de disposición.

La capacidad para acelerar y facilitar el cambio entre la vista en plano y el despliegue de la sección cruzada del modelo es una característica muy útil que permite al usuario tener una mejor perspectiva en tres dimensiones entre los parámetros de entrada del modelo y los resultados de la simulación.

4.4.3 Diseño de la malla

La malla se utilizó principalmente para moverse de forma simple en el plano del sitio, así como la de observar y asignar los parámetros tales como los datos para los pozos de bombeo y los de observación de una mejor manera y acceder a una zona del sitio en particular.

Visual Modflow permite alternar el dominio del modelo sobre el mapa del sitio (formato DXF o BMP) para alinear la malla del modelo con las características del sitio y la dirección del flujo de agua subterránea.

La malla de las diferencias finitas puede ser modificada con la adición, eliminación, movimiento y refinado de los renglones, columnas y capas usando métodos estándares y de fácil uso.

Una malla mal diseñada puede causar una inestabilidad numérica y puede llevar a una solución del modelo de "no-convergente". Por consiguiente, es importante diseñar la malla con un espaciamiento apropiado para dar un nivel de detalle necesario en las regiones importantes del modelo y mantener la estabilidad numérica necesaria para la solución de convergencia.

La malla automática de suavización es usada para identificar y arreglar regiones de la malla para aquellas que están mal diseñadas y optimizar la transición del espaciado de la malla pequeña al espaciado de la malla grande.



Como la mayoría de los acuíferos no tienen capas planas, Visual Modflow permite importar datos de la capa superficial de archivos de texto ASCII (X, Y, Z) o Surfer (GRD). La elevación de la capa superficial y espesor pueden visualizarse usando contornos de vista en plano.

Una nueva característica en la última versión de Visual Modflow es la herramienta que permite modificar elevaciones individuales de cada celda usando un editor de arreglo para modificar el valor de la elevación. La elevación de la celda también se puede modificar en cruce seccional usando un método de extensión y compresión al espesor de una celda.

4.4.4 Pozos de bombeo

Los pozos de bombeo o pozos de inyección se pueden aumentar, eliminar, copiar o mover usando herramientas del editor de pozos que permite delinear gráficamente el pozo en pantalla e introducir el tiempo real del programa de bombeo desde el archivo de texto ASCII.

Para sitios con muchos pozos de bombeo, Visual Modflow también puede importar todos los datos relevantes de los pozos de bombeo. Los datos para pozos múltiples se pueden adaptar fácilmente a un pozo sencillo.

La tasa de distribución de bombeo entre las capas se calcula automáticamente basada en la capacidad de transmisión de las capas a través de las cuales se realiza esta operación. Se puede tener acceso a los detalles del pozo y el programa de bombeo, así como cambiar de forma rápida en cualquier tiempo dado. El punto de observación del pozo puede ajustarse de acuerdo a la posición del pozo con la celda de la malla y el radio del pozo. (Guiguer, N. *et al.*, 1999)

4.4.5 Propiedades

Modflow establece las propiedades del modelo, atributos físicos o químicos que permanecen estáticos a través de la simulación completa. El modelo separa las propiedades en dos categorías distintas.

1. Propiedades de Flujo: estas propiedades físicas del modelo afectan la simulación del flujo de agua subterránea e incluyen:
 - ◆ Conductividad hidráulica (K_x , K_y , y K_z)
 - ◆ Almacenamiento específico (S_s)

- ◆ Producción específica (Ss)
- ◆ Porosidad

Cada una de estas propiedades de flujo deben ser definidas por cada celda en el dominio del modelo.

2. Propiedades de Transporte: éstas son propiedades físicas y químicas que afectan el destino y la migración de una pluma contaminante en el agua subterránea e incluyen:

- ◆ Dispersión (Dx, Dy and Dz)
- ◆ Densidad específica (bulk density)
- ◆ Coeficiente de distribución Kd
- ◆ Constante de decaimiento
- ◆ Concentraciones iniciales

Todas las propiedades del modelo están asignadas a celdas o zonas de la malla individuales por cada celda sencilla dibujada, polígonos delineados o alargamientos a una ventana alrededor de las regiones de la malla seleccionada. Cada propiedad diferente de la zona está codificada con un color diferente.

Visual Modflow tiene muchas herramientas para programar el tiempo en que permite copiar la distribución de propiedades de una capa sencilla a cualquier otra capa de esta manera eliminar pasos repetitivos involucrados en el desarrollo de los archivos de entrada del modelo. Valores de propiedades individuales y propiedades de las zonas pueden ser editadas en cualquier tiempo usando la base de datos de propiedades para hacer modificaciones globales.

Para estratigrafía compleja y conductividad hidráulica variada, es importante poder desplegar y modificar las distribuciones de propiedades de vista en plano y cruce seccional y tener una perspectiva apropiada sobre las características geológicas del sitio.

Visual Modflow es el modelo ambiental que permite una vista activa de cruce seccional permitiendo editar y modificar propiedades de la celda.

4.4.6 Condiciones de Frontera

Las condiciones de frontera están soportadas por Visual Modflow e incluyen: estado estable, constante transitoria, ríos, recargas y evapotranspiración.

Cada tipo de condiciones de frontera tiene un código de color específico para diferenciarlas. La conveniencia de herramientas gráficas permiten asignar estas fronteras como celdas sencillas, un polígono de celdas con valores de interpolación automático, un polígono de celdas o una ventana rectangular de celdas. Para simulaciones transitorias las condiciones de frontera de tiempo real pueden introducirse directamente o importarse desde archivos de texto ASCII.

Las trayectorias de partícula previas o anteriores pueden ser asignadas muy fácilmente determinando transporte advectivo, sendas de flujo preferido delimitando las zonas de pozos de captura.

4.4.7 Pozos de Monitoreo

Visual Modflow permite asignar pozos de observación multiniveles, tantos como se tengan en el sitio, además, permite agrupar los puntos de observación en uno o más grupos. Esta característica grupal es usada para interpretar los datos de calibración en una sección o secciones aisladas del dominio del modelo, así como para simulaciones de modelos complejos de más de un acuífero sobre una región grande.

Las herramientas del graficador permiten asignar puntos de observación o importar datos en situaciones donde se tienen datos temporales para muchos puntos de observación. Una vez que se coloca un pozo de observación, éste se puede mover, cambiar a cualquier lugar con el dominio del modelo.

4.4.8 Calibración del plano de dispersión

Visual Modflow grafica los valores calculados con los observados de las concentraciones para flujos y modelos de transporte de contaminantes, respectivamente. Esta gráfica puede ser usada para examinar toda calibración desde las entradas del dominio del modelo o puede ser usada para examinar grupos específicos de puntos de observación relacionados a ciertas secciones del modelo.

La habilidad para seleccionar grupos predefinidos de puntos de observación se usa particularmente para modelos grandes y complejos de agua subterránea que incluyen varios sistemas de acuíferos diferentes.



Las estadísticas de la calibración son también desplegadas con el gráfico y son puestas al día de acuerdo a los datos del plano de dispersión. Las estadísticas de la calibración incluyen:

-  Error principal
-  Error principal absoluto
-  Desviación estándar
-  Raíz cuadrada del error
-  La norma de la raíz cuadrada del error

El 95% del intervalo de confianza se indica en el gráfico de valores calculados vs. observados. El dato de calibración localizado con este intervalo puede esperar resultados correctos el 95 % de las veces.

4.4.9 Velocidades

Los vectores de las velocidades de flujo proporcionan una representación importante de la dirección del flujo de agua subterránea con una capa, renglón o columna en particular. Cada vector velocidad tiene un código de color para indicar si éste es un flujo alto o bajo en relación al plano desplegado.

4.4.10 Zona supuesta

Visual Modflow proporciona un resumen detallado de los resultados del balance de masa y el intercambio de flujo zona a zona. Estos resultados del balance dan información importante sobre la calidad y confiabilidad del modelo de agua subterránea que se tiene que construir.

La tabla que a continuación se presenta contiene los datos generales de los parámetros de flujo y los parámetros de transporte requeridos y alimentados al modelo.

Tabla 4.1 Propiedades generales requeridas por Modflow

Parámetros de flujo		
Parámetro	Valor	Unidades
Conductividad Hidráulica (kx, ky, kz)	4.5E-5	m/s
Coefficiente de almacenamiento (S)	1.0E-4	l/m
Porosidad efectiva	0.19	
Porosidad total	0.38	
Recarga	127	mm/año
Evapotranspiración	645	mm/año
Parámetros de Transporte		
Dispersión Longitudinal	10	m
Dispersión Horizontal	0.1	m
Dispersión Transversal	0.01	m
Coefficiente de Dispersión	0	m ² / día
Coefficiente de distribución Kd (benceno)	1e-7	L/mg
Coefficiente de distribución Kd (tolueno)	1e-6	L/mg

4.5 Modelo para la evaluación de riesgo a la salud

En la evaluación de riesgo a la salud se empleo el marco de trabajo Risk Based Corrective Action (RBCA), este utiliza las ecuaciones de riesgo generales establecidas para evaluaciones de riesgo, entre las cuales se encuentran las de concentraciones en suelo por ingestión, inhalación y contacto dérmico para cáncer y no cáncer, y las concentraciones en suelo por ingestión de agua contaminada por lixiviación del suelo y las agrupa de tal forma que permiten ser integradas en un esquema de evaluaciones por niveles, considerando procesos de transporte, mecanismos de atenuación y valores de exposición.

Es importante hacer mención que RBCA (Risk Based Corrective Action) es más que un modelo, un marco de trabajo que contiene las herramientas necesarias para las evaluaciones de riesgo y este ha sido desarrollado por la ASTM (American Society of Testing and Materials). Las siguientes propiedades y factores fueron empleados en la evaluación de riesgo con RBCA.



Tabla 4.2 Factores de exposición

Parámetros de Exposición	Residencial			Comercial		
	Edad promedio	Adulto	0-6	0-16	Crónica	Construcción
Tiempo promedio (carcinógenos, años)	70					
Tiempo promedio (no carcinógenos, años)	30				25	1
Peso promedio (kg)	70	15	35	70		
Duración de la exposición (años)	30	6	16	25	1	
Frecuencia a la exposición (días/año)	350			250	180	
Frecuencia de exposición dérmica (días/año)	350			250		
Área superficial de la piel, contacto con el suelo (cm ²)	5800		2023	5800	5800	
Factor de adherencia dérmica del suelo (mg/cm ² /día)	1					
Tasa de ingestión de agua (L/día)	2			1		
Tasa de ingestión del suelo (mg/día)	100	200		50	100	
Tiempo de exposición por nadar (hr/evento)	3					
Frecuencia de evento por nado (evento/año)	12	12	12			
Tasa de ingestión de agua por nadar (L/hr)	0.05	0.5				
Área superficial de la piel, por nadar (cm ²)	2300		8100			
Tasa de consumo de pescado (kg/día)	0.025					
Fracción de peces contaminados (adimensional)	1					

4.5.1 Parámetros de suelo para la evaluación de riesgo con RBCA

Tabla 4.3 Hidrogeología

Parámetro		Unidades
Profundidad del acuífero	300	cm
Espesor de la zona capilar	5	cm
Espesor de la columna de suelo	295	cm



Tabla 4.4 Área de suelo afectado

Parámetro		Unidades
Profundidad de la parte superior del suelo afectado acuífero	0	cm
Profundidad a la base del suelo afectado	300	cm
Área de suelo afectado	2E+07	cm ²
Longitud de suelo afectado paralelo a la dirección del viento	4500	cm
Longitud de suelo afectado paralelo a la dirección del agua subterránea	4500	cm

Tabla 4.5 Valores de la columna de suelo

Parámetro	Unidades	
Porosidad total	0.38	
Contenido volumétrico de agua de zona vadosa y frontera capilar	0.12	0.342
Contenido volumétrico de aire de zona vadosa y frontera capilar	0.26	0.038
Densidad aparente en seco	1.7	kg/L
Conductividad hidráulica vertical	8.6E+2	cm/d
Permeabilidad de vapor	1.0E-8	cm ²
Espesor de la zona capilar	5.0E+0	cm
Tasa de infiltración neta	30	cm/año
Fracción de carbono orgánico del suelo (zona saturada)	0.01	
pH del suelo	6.8	



4.5 2 Parámetros de agua subterránea para la evaluación de riesgo con RBCA

Tabla 4.6 Hidrogeología

Parámetro		Unidades
Velocidad de Darcy	6.9E+0	cm/día
Velocidad de goteo de agua subterránea	1.8E+1	cm/día
Conductividad hidráulica	6.9E+2	cm/día
Gradiente hidráulico	1.0E-2	
Porosidad efectiva	0.38	
Fracción de carbono orgánico en la zona saturada	0.001	
pH del agua subterránea	6.2	
Ancho de la pluma contaminante	4500	cm
Espesor de la zona de mezclado	200	cm

Tabla 4.7 Valores de dispersión

Parámetros		Unidades
Distancia los receptores del agua subterránea	1702	cm
Dispersión longitudinal	170.2	cm
Dispersión transversal	56.16	cm
Dispersión vertical	8.51	cm

4.5.3 Parámetros de aire

Tabla 4.8 Dispersión en aire

Parámetros		Unidades
Distancia del receptor a la fuente	1701.9	cm
Dispersividad horizontal	198.29	cm
Dispersividad vertical	135.23	cm
Zona de Mezclado		
Altura de la zona de mezclado	200	cm
Velocidad de aire en la zona de mezclado	225	cm/s
Flujo de emisión de partículas por área	6.9E-14	g/cm ² /s



Capítulo 5

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A continuación se presentan los resultados del modelo Modflow. Las figuras 5.1 a 5.3 corresponden a los resultados para benceno.

La figura 5.1 presenta el área con los puntos de muestreo realizados en el año 2000. Las figuras 5.2 y 5.3 muestran las plumas de dispersión para 2 y 10 años respectivamente. En éstas se puede observar, el aumento del área de dispersión así como también una disminución en la concentración.

Las figuras 5.4 a 5.6 corresponden a los resultados para tolueno. La figura 5.4 contiene el área con los puntos de muestreo y las figuras 5.5. y 5.6 presentan las plumas de dispersión.

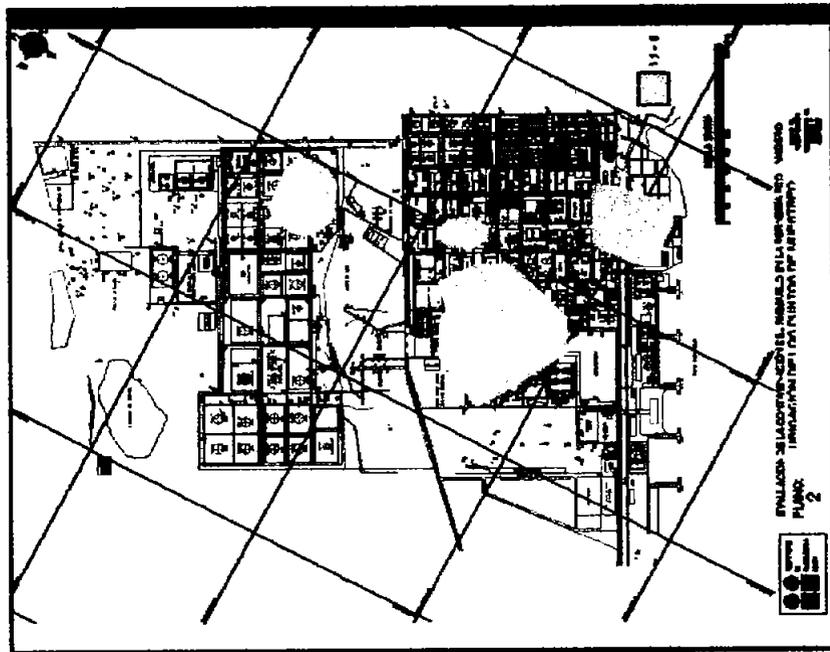
Las figuras 5.7 a 5.9 y las 5.10 a 5.13 corresponden a los resultados para vanadio y hierro respectivamente.

Las figuras 5.7 y 5.10 presentan los puntos de muestreo y el resto corresponde a las plumas de dispersión.

Las tablas 5.1 y 5.3 presentan los resultados para la evaluación de riesgo a la salud con el modelo RBCA.

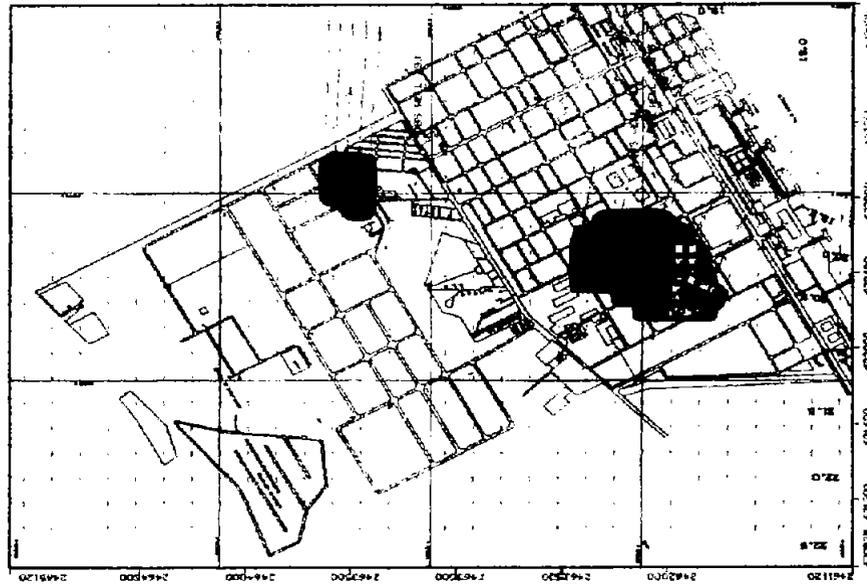
RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.1 Resultados obtenidos del modelo modflow (plumas de dispersión para benceno Figura 5.2 y 5.3).



□ 1.0- 8.0 mg/L

Figura 5.1
Puntos de muestreo para benceno (2000)



0.5 mg/L
1.0 mg/L
1.5 mg/L
2.0 mg/L
2.5 mg/L
3.0 mg/L

Figura 5.2
Resultados de predicción de la pluma de dispersión de benceno (2 años)

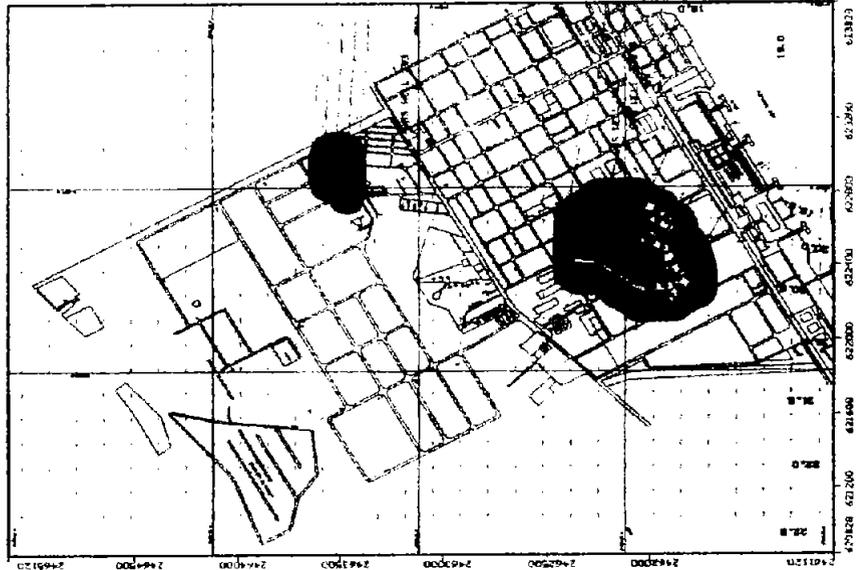
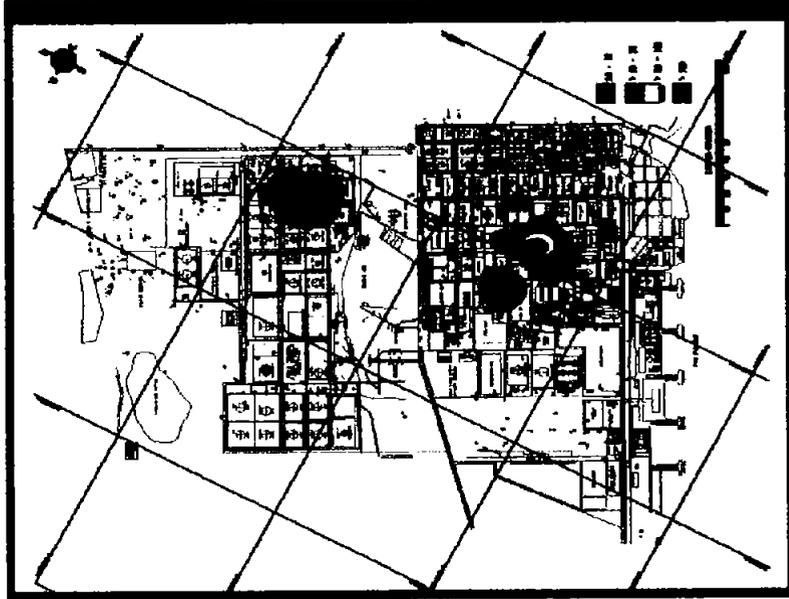


Figura 5.3
Resultados de predicción de la pluma de dispersión de benceno (10 años)

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

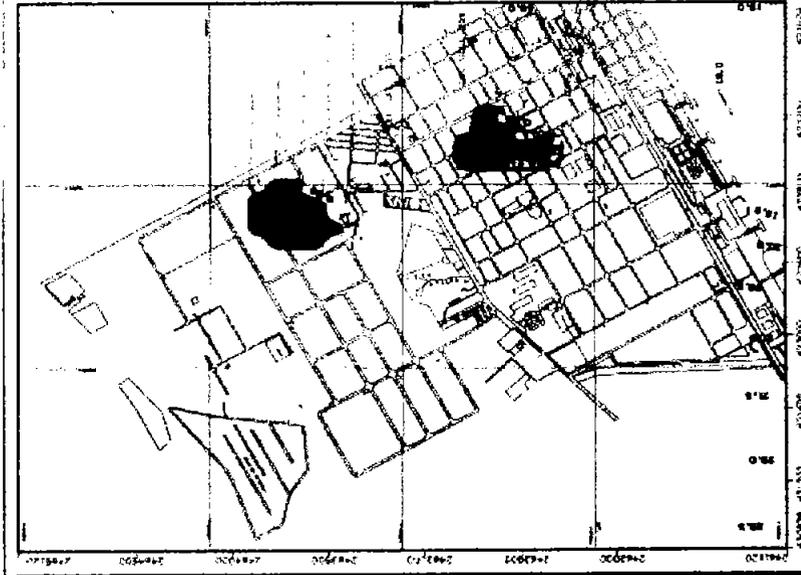
5.2 Resultados obtenidos del modelo modflow (plumas de dispersión para tolueno Figura 5.5 y 5.6).



0.005-0.05 mg/L
0.06 - 0.20 mg/L
0.21 - 0.34 mg/L
0.35 mg/L

Figura 5.4

Puntos de muestreo para tolueno
(2000)



0.05 mg/L
0.10 mg/L
0.15 mg/L
0.20 mg/L
0.25 mg/L

Figura 5.5

Resultados de predicción de la pluma
de dispersión de tolueno
(2 años)



Figura 5.6

Resultados de predicción de la pluma
de dispersión de tolueno
(10 años)

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.3 Resultados obtenidos del modelo modflow (plumas de dispersión para vanadio Figura 5.8 y 5.9).

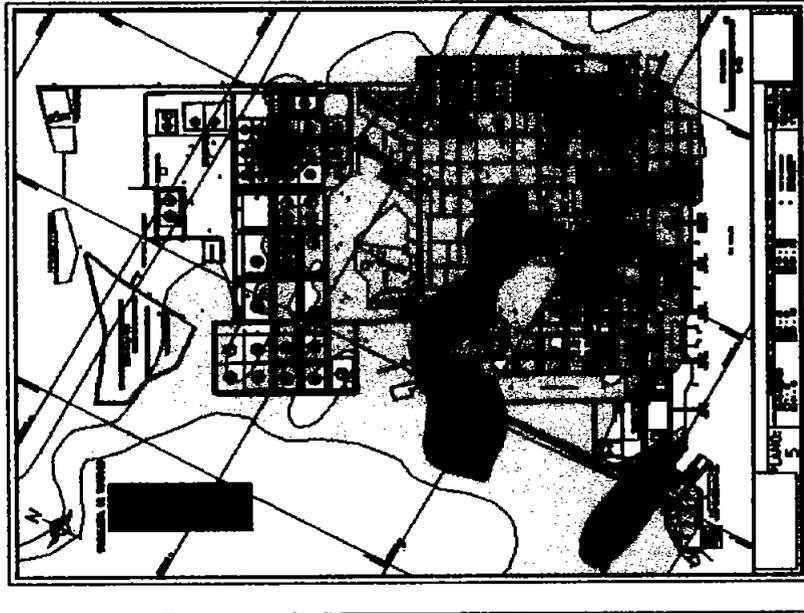


Figura 5.7
Puntos de muestreo para vanadio
(2000)

No detectado
0.05 - 0.06 mg/L
0.07 - 0.09 mg/L
0.1 - 1.0 mg/L
1.1 - 1.5 mg/L
1.6 - 2.0 mg/L
2.1 - 2.5 mg/L
2.6 - 3.0 mg/L
3.0 mg/L

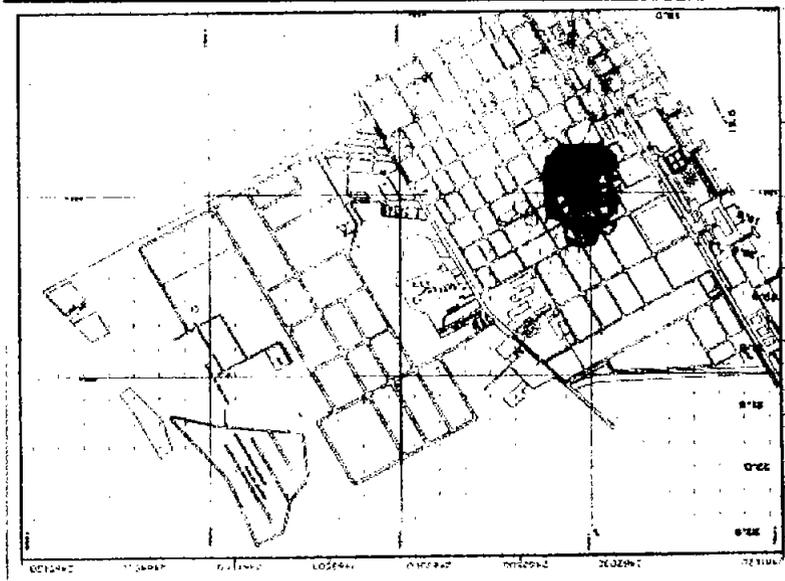


Figura 5.8
Resultados de predicción de la pluma
de dispersión de vanadio
(2 años)

0.5 mg/L
1.0 mg/L
1.5 mg/L
2.0 mg/L
2.5 mg/L
3.0 mg/L

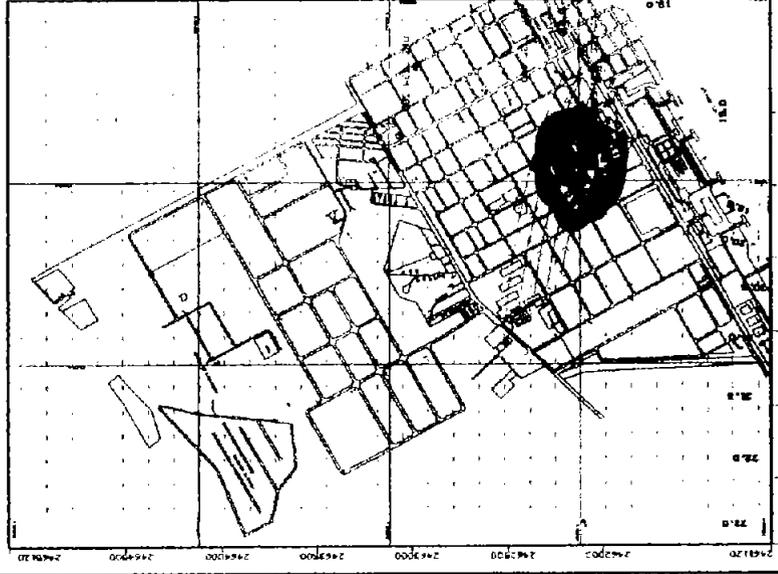


Figura 5.9
Resultados de predicción de la pluma
de dispersión de vanadio
(10 años)

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

5.4 Resultados obtenidos del modelo modflow para hierro (plumas de dispersión para hierro Figura 5.11 y 5.12).

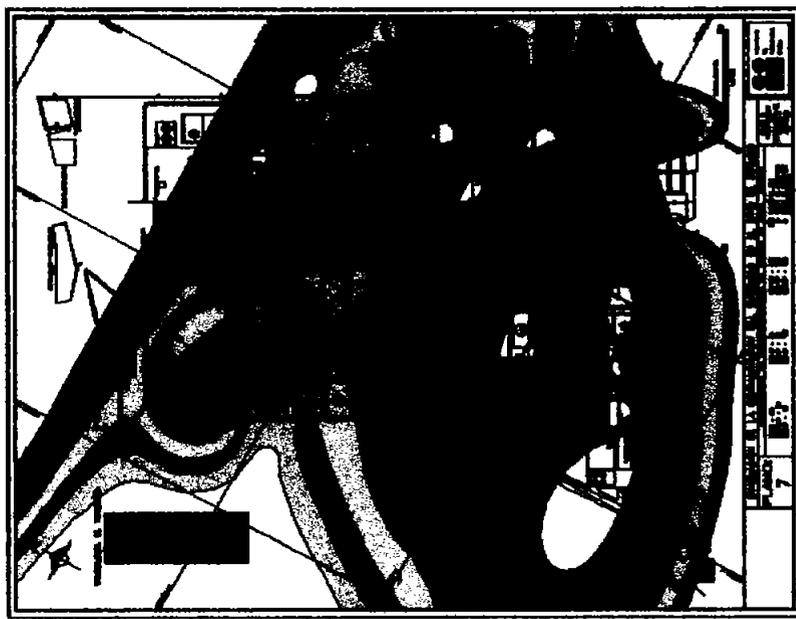


Figura 5.10
Puntos de muestreo para hierro
(2000)



Figura 5.11
Resultados de predicción de la pluma
de dispersión de hierro
(2 años)



Figura 5.12
Resultados de predicción de la pluma
de dispersión de hierro
(10 años)



5. 5 Resultados de la evaluación de riesgo RBCA (Risk Based Corrective Action)

Tabla 5.1 Resultados del marco de trabajo RBCA

Compuesto	Clase	Límite de Riesgo Aceptable	Riesgo Total Acumulado		Cociente de Peligrosidad		
					Límite Aceptable	Valor Total	
			SUELO	AGUA		SUELO	AGUA
BENCENO	A	1.0E-5	5.2E-6	3.6E-11	1.0E+0	2.3E-4	7.3E-7
TOLUENO	D	1.0E-5	4.1E-7	2.2E-11	1.0E+0	2.2E-4	1.9E-2
HIERRO	SC	1.0E-5	1.9E-9	NC	1.0E+0	4.2E-4	9.7E-2
VANADIO	SC	1.0E-5	2.8E-6	NC	1.0E+0	3.8E+0	1.39E+1

Tabla 5.2 Pluma de Dispersión para cada contaminante obtenidas con el modelo Modflow con la predicción o simulación a 2 años (dimensiones).

	Area (m ²)	Longitud (m)	Ancho (m)
BENCENO (2años)	100737.2	377.8	266.7
TOLUENO (2años)	184700	488.9	377.8
VANADIO (2años)	231050.2	577.8	399.9
HIERRO (2años)	283942	555.5	511.1

Tabla 5.3 Resultados de riesgo a la salud obtenidos a partir de la pluma de dispersión para cada contaminante de la simulación a 2 años.

Compuesto	Clase	Límite de Riesgo	Riesgo Total Acumulado		Cociente de Peligrosidad		
					Límite Aplicable	Valor Total	
			SUELO	AGUA		SUELO	AGUA
BENCENO	A	1.0E-5	7.2E-7	1.3E-3	1.0E+0	1.7E-2	2.7E+1
TOLUENO	D	1.0E-5	4.1E-7	2.8E-9	1.0E+0	2.2E-4	2.2E-2
HIERRO	SC	1.0E-5	1.9E-9	NC	1.0E+0	5.9E-4	6.9E-2
VANADIO	SC	1.0E-5	2.7E-4	NC	1.0E+0	3.6E+0	1.3E+1



5. 6 Niveles de Limpieza requeridos con RBCA antes y después de aplicar Modflow

El nivel de limpieza requerido para no exceder los límites aceptables del benceno en agua deberá ser de 2.7 mg/kg y para el caso de vanadio deberán ser de 3.6 mg/kg. Las concentraciones del muestreo fueron de 7.2 mg/kg en suelo para la concentración más alta para el benceno y de 28.8 mg/kg para vanadio.

Discusión de Resultados

Las plumas de dispersión obtenidas con el modelo Modflow permiten observar el avance de la fuente de contaminación en la dirección del flujo de agua subterránea de noroeste a suroeste.

Es importante hacer notar que no hay un cambio aparente de forma significativa en la concentración del benceno cuando se encuentra presente en bajas concentraciones.

En la Figura 5.2 se observa la superficie de mayor concentración con una notable disminución de la concentración de benceno.

Una de las razones por lo que esto sucede, es por la presencia de los pozos de bombeo cercanos al área de estudio, donde el benceno se encuentra en concentraciones altas. Los pozos evitan que la contaminación se extienda y en algún momento llegue hasta la población más cercana de acuerdo a la dirección de las partículas mostradas en la Figura 5.2 con las flechas verdes, así como a la dirección del flujo del agua subterránea. Al realizarse el bombeo de agua, parte del contaminante es arrastrado por lo tanto la concentración disminuye. De no existir estos pozos, probablemente la concentración avanzaría sin una notable disminución; además el avance se estaría llevando a cabo por los dos fenómenos de transporte como son la dispersión y advección.

La concentración de benceno disminuye de 3.2mg/kg de suelo a 0.5mg/kg como se observa en la primera pluma de dispersión Figuras 5.2, más no sucede así, en la pluma que se encuentra en el ángulo superior derecho donde la concentración es de 0.4 mg/kg y no se nota un cambio, sólo se observa el movimiento del contaminante.

Entre menor es la cantidad de benceno, la disminución en la concentración es menos apreciable.

En las Figuras 5.2 y 5.3 se muestran dos plumas de dispersión para el benceno, en la primera se compara el avance de la contaminación a dos años y en la segunda el avance a 10 años como se puede observar, hay un mayor avance en la pluma de dispersión a 10 años, aunque los niveles de concentración son muy bajos.

El comportamiento en las plumas de dispersión para el tolueno (Figuras 5.4 y 5.5) es similar a la del benceno.

De acuerdo con los resultados el límite de riesgo es aceptable para compuestos carcinogénicos en suelo y agua, cuando la evaluación de riesgo se lleva a cabo sólo con el uso del modelo RBCA. Para el benceno no se rebasa debido a que éste es de $5.2E-6$ y $3.6E-11$ respectivamente siendo el límite permisible de $1E-5$.

El cociente de peligrosidad es 1 y tampoco se rebasa, el cual es de $2.3E-4$ en suelo y de $7.3E-7$ en agua.

Sin embargo para la evaluación de riesgo hecha después de aplicar los resultados de la pluma de dispersión obtenida con el modelo modflow el límite de riesgo así como el cociente de peligrosidad sobrepasa los límites máximos permisibles para benceno, en agua, para riesgo es $1.3E-3$ y el cociente de peligrosidad $2.7E+1$.

Para el tolueno el cociente de peligrosidad calculado para suelo antes y después de usar los resultados del modelo modflow es el mismo de $2.2E-4$, sin embargo para el agua cambia, porque antes de usar los resultados del modflow se tiene un cociente de peligrosidad de $1.9E-2$, que es menor comparado con el obtenido después de aplicar la pluma de dispersión $2.2E-2$. En ningún caso se excede el límite.

En el caso de los metales, el vanadio excede los límites permisibles para el cociente de peligrosidad tanto antes como después de usar la pluma de dispersión obtenida con el modelo Modflow, aun cuando las concentraciones de vanadio no son tan altas, 5mg/L y ésta disminuye hasta 0.5mg/L , como se observa en la pluma de dispersión (Figura 5.8).

Los resultados del modelo RBCA para el cociente de peligrosidad fueron de 3.8 en el suelo y 1.39 en agua, empleando ambos modelos Modflow y RBCA se obtuvieron 3.6 en suelo y 1.3 en agua.

Para el hierro la dosis requerida para que cause un daño a la salud debe ser mayor a 613000 mg/kg. El hierro es uno de los elementos esenciales para el desarrollo de un organismo, sin embargo una concentración más elevada resulta tóxica. En el sitio en estudio el límite máximo aceptable no se rebasa.

Se realizó un análisis comparativo de la evaluación de riesgo a la salud para este metal, primero se utilizó el modelo RBCA y posteriormente se hizo la misma evaluación de riesgo a la salud con el modelo modflow tomando las plumas de dispersión de éste, para la evaluación de riesgo a la salud en el modelo RBCA.

Los resultados obtenidos para el cociente de peligrosidad empleando únicamente el modelo RBCA fueron de $4.2E-4$ en suelo y $9.7E-2$ en agua para el hierro. Se empleó la pluma de dispersión obtenida con el modelo modflow en el modelo RBCA y los resultados fueron de $5.9E-4$ en suelo y de $6.9E-2$ en agua. Como se puede observar sí hay un cambio, lo que significa un efecto importante al usar un modelo para obtener la pluma de dispersión y posteriormente realizar la evaluación de riesgo con el modelo RBCA, que si sólo se usara éste de manera individual. Es importante hacer notar que las concentraciones de hierro disminuyen sólo por el fenómeno de dispersión desde 140mg/L hasta 20mg/L.

Como se pudo observar, de los compuestos analizados sólo el benceno en agua rebaso el límite de riesgo y el cociente de peligrosidad se excedió después de aplicar el modelo modflow.

Para el vanadio se exceden los límites aceptables de cociente de peligrosidad antes y después de usar la pluma de dispersión obtenida con el modelo modflow.



Capítulo 6

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

6.1 Conclusiones

De acuerdo con las plumas de contaminación obtenidas con el modelo Modflow las zonas más contaminadas se encuentran al centro y sureste del sitio de estudio.

Con el modelo RBCA se evaluó el riesgo de los contaminantes en estudio, se observó que se presenta riesgo en el caso del benceno y el vanadio.

Se demostró que el valor de riesgo obtenido para benceno es mayor cuando se aplican los resultados de la pluma de dispersión obtenida por el modelo Modflow, que cuando sólo se hace la evaluación de riesgo con el modelo RBCA; lo mismo sucede con el vanadio, no así con el tolueno y el hierro que no exceden los límites de riesgo, en ninguno de los casos.



Es importante hacer notar que aunque las concentraciones de hierro son muy elevadas, el análisis de riesgo a la salud puede indicar que no hay necesidad de disminuir los contenidos de este metal, debido a que para exceder los límites de riesgo sería necesario rebasar las concentraciones de hierro asimilable por el organismo.

El uso del modelo RBCA proporciona resultados aceptables, así como los límites de riesgo para el benceno, tolueno, hierro y vanadio.

Cuando se utiliza la pluma de dispersión obtenida con el modelo geohidrológico Modflow y se determina el riesgo con el modelo RBCA, los límites de riesgo se modifican, es decir si se emplea de forma aislada el modelo RBCA no se obtiene un riesgo aparente. Sin embargo cuando se emplean en forma consecutiva los dos modelos Modflow y RBCA se obtiene un resultado distinto, es decir se puede encontrar riesgo que antes no se observaba, cuando sólo se aplicaba el modelo RBCA.

6.2 Recomendaciones

La influencia de un modelo sobre otro es notoria ya que al aplicar primero el modelo Modflow que calcula la pluma de dispersión y luego realizar la evaluación de riesgo, los límites resultantes son mayores, por ello cuando se aplica el modelo RBCA, es conveniente aplicar ambos modelos en la evaluación de riesgo a la salud.

Es conveniente obtener las plumas de dispersión para los demás compuestos contaminantes tales como antraceno, benzo(a)pireno, benzo(k)fluoranteno, cadmio, etilbenceno, fenentreno, fluoreno, metiliterbutileter, naftaleno, pireno, plomo, xileno y zinc, que se encuentran en el sitio en estudio. Se recomienda hacer uso de los dos modelos, es decir el modelo geohidrológico y el modelo RBCA, cuando se quieren hacer evaluaciones de riesgo para disminuir posibles errores cuando sólo se usa el modelo RBCA.



REFERENCIAS

ASTM (American Society for Testing and Materials) (1998) Standard provisional Guide for Risk Based Corrective Action. Designation: PS 104-98, West Coshonhocken, PA.

Bennett, G. C., Miller, D.R. Piotrowski, J.K. and Sors, A. (1985) Methods for estimating Risk of Chemical Injury: Human and Non-human Biota and Ecosystems, Edited by V. B. Vouk, G. C. Bennett, D.G. Hoel and D.B. Peakall. SCOPE.

Bowen, R. (1980) Grounwater, Second Edition, Elsevier Applied Science Publishers, London and New York. Pag. 49-50

Camacho L. M., (2003) "Modelaje Ambiental" Universidad Autónoma de Ciudad Juárez <http://docentes.uacj.mx/lcamacho/fenomenos.htm>.

CHRIS (Chemical Hazards Response Information System) (2000) Database.

Cornell (1999), Iron Toxicity, What you don't know. <http://ansci.cornell.edu/plants/toxicagents/iron.html>

Domenico P. A., Schwartz F. W., (1990) "Physical and Chemical Hydrogeology" Cap.10, 362-364

GSI, Groundwater Services Inc. (2000), RBCA Tool Kit for Chemical Releases software v.1.3a, Houston.

GSI, Groundwater Services Inc. (1998), Guidance Manual for RBCA Tool Kit for Chemical Releases software v.1.3a, Houston.

Guiguer, N.and Franz, T. (1999) Visual MODFLOW User's Manual, "The Fully Integrated, tree dimensional, graphical modeling enviroment for profesional groundwater flow and contaminant transport modeling". Waterloo hydrologic Inc. Waterloo, Ontario, Canadá xiii-xiv

Hoffmann, K. A., Steve, T. C. (1993) Computational Fluid Dynamics for Engineers. Engineering Education System, USA. Volumen 1, 30-47

IPCS (Programa Internacional de Seguridad de las Sustancias Químicas, Fichas internacionales de seguridad química, "Benceno"

IRIS (Integrated Risk Information System) (2003a) "Benzene" U.S. Environmental Protection Agency, <http://www.epa.gov/IRIS/toxreviews/0276-tr.pdf>

IRIS (Integrated Risk Information System) (2003b), "List of IRIS Substances", U.S.EPA, Office of Research and Development, National Center for Environmental Assessment, <http://www.epa.gov/iris/index.html>

Iturbe, R. Silva, A. E. (1992) Agua Subterránea y Contaminación, Instituto de Ingeniería, UNAM, México D. F., 2-7

Iturbe, R. (1998), Control de Contaminación de Suelos y Acuíferos, Instituto de Ingeniería, UNAM, México D. F.

Iturbe, R.; Flores, C.; Flores, R. M.; Chávez C.; Rodríguez, R. D.; Ramírez, A.; Rocha, M.; Perez, G.; Flores, J. (1999), Grupo: Saneamiento de suelos y acuíferos, Instituto de Ingeniería,
"Evaluación de la contaminación y niveles de limpieza requeridos en subsuelo y acuíferos de la refinería Francisco I Madero, en Tamaulipas".

Iturbe, R.; Flores, C.; Flores, R. M.; Chávez C.; Rodríguez, R. D.; Rocha, M.; Pérez, G. (2000), Grupo: Saneamiento de suelos y acuíferos, Instituto de Ingeniería,
"Evaluación de la contaminación en el suelo y subsuelo en la antigua terminal de almacenamiento y distribución de Zacatecas, Zacatecas" , 7-9.

Iturbe, R.; Flores, C.; Flores, R. M.; Chávez C.; Rodríguez, R. D.; Ramírez, A.; Perez, G.; Flores, J. (2002), Grupo: Saneamiento de suelos y acuíferos, Instituto de Ingeniería,
"Evaluación de la contaminación y niveles de limpieza requeridos en subsuelo y acuíferos de la refinería Francisco I Madero, en Tamaulipas".

John H. Montgomery, Linda M Welkom, (1990) "Grounwater Chemical Desk Reference" Second Printing USA Toluene Pag. 501, Benzene, 30

Karickhoff, S W. Brown, D S y Scott, T A. (1979) "Sorption of hydrophobic pollutants on natural sediments", Water Research, vol 13, EUA, 241-248

LaGrega, M. D, Buckingham, P. L. y Evans, J. C. (1994), Gestión de Residuos Tóxicos (Traducido de Hazardous Waste Management). Mc Graw Hill, EUA, 641-648

Mc Donald, M.G. y Harbaugh, A. W., A (1984) Modular three-Dimensional Finite-Difference Groundwater Flow Model. Scientific Publication Co. Washington. D.C.

MDEQ (Michigan Department of Environmental Quality) (2003), Toxicological and Chemical-Physical Data for Part 201 Generic Cleanup Criteria and Screening Levels" . <http://www.deq.state.mi.us/documents/deq-erd-part201rr-Rule752table.pdf>

Moore, R. A. (1992) Assessment of Health Risk from Wastes in Three Surface Impoundments en Hoddinott, KB (ed), Superfund Risk Assessment in Soil Contamination Studies. ASTM Publcation 04-011580-38, ASTM, Philadelphia

MSDEQ (Mississippi Deparment of Environmental Quality) (2002), Mississippi of Environmental Quality Tier 1 TRG Table, Subpart II, Mississippi of Environmental Quality, Risk Evaluation Procedure for Voluntary Cleaup And Redevelopment of Brownfield Sites , Final Brownfield Regulations, Subpart II, February 28, 2002, EUA., <http://www.deq.state.ms.us/documents/deq-part201rr-Rule752table.pdf>

Muni Budhu "Soil Mechanics & Foundations" , Deparment of Civil Engineering & Engineering Mechanical, University of Arizona. Pag. 14-16.

Murray McBride, (1994) "Environmental Chemistry of Soils", University Press, New York

NRC (National Research Council) (1983). Risk Assessment in the Federal Government: Managing the Process. National Academy Press. Washington, D.C.

RAIS (Risk Assessment Information System) (2003a) "Toxicity Values" U.S. Environmental Protection Agency's (EPA), <http://rais.ornl.gov/tox/toxvals.shtml>

RAIS (Risk Assessment Information System) (2003b) "Toxicity & Chemical-Specific Factors to Iron" U.S. Environmental Protection Agency's (EPA), http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/TOX_9801

RAIS (Risk Assessment Information System) (2003c) "Toxicity & Chemical-Specific Factors to Vanadium Metallic" U.S. Environmental Protection Agency's (EPA), http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/TOX_9801

RAIS (Risk Assessment Information System) (2003d) "Toxicity & Chemical-Specific Factors to Toluene" U.S. Environmental Protection Agency's (EPA), http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/TOX_9801

RAIS (Risk Assessment Information System) (2003e) "Toxicity & Chemical-Specific Factors to Benzene" U.S. Environmental Protection Agency's (EPA), http://risk.lsd.ornl.gov/cgi-bin/tox/TOX_9801

Risk Based Decision-Making for Assessing Petroleum Impacts at Exploration and Production Sites. Edited by: Sara J. Millen, Chevron Research and Technology Company Renae I. Magaw, Chevron Research and Technology Company. 169

Rocha, M. (2000) Tesis: Evaluación de la contaminación, criterios y alternativas de rehabilitación en los talleres de ferrocarriles nacionales de México (FNM) en Aguascalientes, Ags., México. 6-9

"Simulación numérica del transporte y difusión de contaminantes en suelos" <http://146.134.8.133/Feijoo/CmodComplexos/trab-ceb.html>

Todd, D.K., (1980) Groundwater Hydrology, John Wiley&Sons, New York.



Yanenko, N.; Springer_Verlag (1971) "The method of fractional steps"., , New York

Water Resources Investigations Report (1998), 98-4005, U.S. Geological Survey, "Methods and Guidelines for Effective Model Calibration", Denver, Colorado.

Zheng, C. (1990). MT3D, A Modular Three-Dimensional Transport Model, Rockville, MD, S.S. Papadopolus & Assoc.



ANEXO A



Tabla 1. Pozos de Bombeo*

Pozo de observación (CFE)	NF (Nivel Freático) (m)	Caudal (m ³ /8 hrs)	Coordenada x	Coordenada y	Coordenada z
1	0.70	14.40	622716.47	2464142.10	3.682
2	0.85	14.40	622845.62	2463951.31	3.456
3	0.70	14.40	622743.75	2463933.77	3.160
4	0.70	14.40	622602.18	2463826.09	4.016
5	0.70	12.96	622417.43	2463718.65	3.990
6	1.13	14.40	622167.25	2463618.55	4.671
7	1.35	12.96	621966.36	2463474.39	4.611
8	1.25	14.40	622059.68	2463248.84	4.827
9	1.20	14.40	622311.00	2463379.73	4.390
10	1.30	43.20	622532.39	2463414.10	3.758
11	1.30	72.00	622626.32	2463437.26	3.938
12	1.20	11.52	622741.39	2463618.10	3.885
13	1.00	14.40	622871.23	2463682.99	3.627
14	1.30	12.96	622980.52	2463734.92	3.403
15	1.00	14.40	623101.28	2463510.26	3.550
16	0.95	14.40	623168.74	2463389.07	3.430
17	2.05	14.40	621869.64	2463697.65	4.883
18	1.60	14.40	622373.36	2461509.73	2.906
19	0.80	12.96	622565.45	2461634.04	2.667
20	2.15	12.96	622723.59	2461703.43	2.813
21	1.73	14.40	622700.97	2461978.65	3.646
22	1.47	14.40	622479.69	2461825.36	3.187
23	1.65	14.40	622298.44	2461716.23	2.997
24	1.80	14.40	623904.40	2462374.49	2.797
25	1.74	12.96	623855.89	2462461.24	2.571
26	2.55	14.40	623734.07	2462279.83	3.085
27	1.70	12.96	623728.43	2462365.63	1.656
28	2.30	14.40	623572.83	2462290.89	3.206
29	0.93	11.52	623448.33	2462132.11	3.029
30	1.39	14.40	622936.56	2462077.47	2.664
31	1.45	11.52	622901.21	2461861.88	3.066
32	2.29	11.52	623126.40	2461941.62	2.629
33	1.89	9.5	623252.91	2461999.83	2.408
34	0.55	11.52	622518.92	2461381.39	1.932



Tabla 1 Pozos de bombeo (continuación)*

Pozo de observación (CFE)	NF (Nivel Freático) (m)	Caudal (m ³ /8 hrs)	Coordenada x	Coordenada y	Coordenada z
35	1.20	11.52	622780.59	2461524.54	1.938
36	0.78	7.2	622993.67	2461682.71	2.590
37	2.42	12.96	623228.50	2461767.57	2.713
38	1.50	9.5	623218.86	2462248.82	3.013
39	1.26	14.4	623359.51	2463248.06	3.374
40	1.36	14.4	623423.37	2463133.23	3.334
41	1.37	11.52	623303.90	2462358.78	2.749
42	1.93	11.52	623509.11	2462978.85	3.314
43	1.83	12.96	623609.61	2462798.56	3.209
44	1.76	14.40	623262.23	2463044.49	3.021
45	1.22	9.5	623566.82	2462500.73	2.925
46	1.49	11.52	623143.17	2462976.17	3.027
47	1.22	14.40	623789.68	2462662.75	2.893
48	1.40	14.40	623218.86	2462838.19	3.240
49	1.64	8.64	623667.86	2462654.40	3.270
50	1.67	13.53	623331.34	2462922.15	2.884
51	2.08	12.96	623457.27	2462714.99	2.914
52	2.22	14.40	623350.76	2462604.76	2.966
53	1.82	14.40	623781.20	2462457.88	2.854
54	2.11	7.2	623648.31	2462354.57	3.011
55	1.42	10.08	623175.80	2463166.55	3.112
56	1.67	14.40	623398.34	2462210.55	3.247
57	2.28	11.52	623487.16	2462259.69	2.911
58	1.78	14.40	622555.89	2464089.17	3.990



Tabla 2 Toxicidad y Factores Químicos

Sustancia	Factor de Absorción Dérmico	Coef. Transf. Carne (día/kg)	Punto de ebullición (°C)	Factor de difusión en aire (cm ² /s)	Factor de Difusión en agua (cm ² /s)	Factor de Bioactividad Consumo de pescado (L/kg)
<i>Hierro</i>	0.001	2.0E-02	482.98			3.2E-00
<i>Vanadio</i>	0.001	2.5E-03	482.98			3.2E-00
<i>Benceno</i>	0.01	3.1E-06	80	0.088	9.8E-6	8.7E+00
<i>Tolueno</i>	0.01	1.3E-05	110.6	0.087	8.6E-6	2.5E+01

Sustancia	Factor de Absorción GI	Constante de la ley de Henry	Coef. de Partición Carbono Orgánico (L/kg)	Constante Permeabilidad (cm/hr)	Log Coef. de Partición Octanol Agua	Coef. Transf. por Leche (día/kg)
<i>Hierro</i>	0.15	1	14.3	2.47E-5	-0.77	3.0E-05
<i>Vanadio</i>		1	14.3	2.0E-5	0.23	2.0E-05
<i>Benceno</i>	0.97	0.227	165.5	0.0207	2.13	9.9E-07
<i>Tolueno</i>	0.8	0.271	268	0.0453	2.73	4.0E-06

Sustancia	Punto de Fusión (°C)	Peso Molecular (g/mol)	Solubilidad en Agua (mg/L)	Presión de Vapor (mmHg)
<i>Hierro</i>	188.6	55.85	624000	4.24E-9
<i>Vanadio</i>	188.6	50.94	86400	4.24E-9
<i>Benceno</i>	5.5	78.11	1790	94.8
<i>Tolueno</i>	-94.9	92.14	526	28.4



Tabla 3 Concentraciones en suelo y agua para Benceno*

Punto de Muestreo	Benceno En suelo mg/kg	Benceno En agua mg/L	Punto de Muestreo	Benceno En suelo mg/kg	Benceno En agua mg/L
12	0.0010	5.5865E-07	201	5.0E-05	2.7933E-08
38	0.1480	8.2681E-05	225	0.0340	1.8994E-05
43	0.0010	5.5865E-07	226	5.0E-05	2.7933E-08
60	0.1030	5.7541E-05	227	0.0200	1.1173E-05
59	0.0015	8.3798E-07	231	5.0E-05	2.7933E-08
68	0.0230	1.2849E-05	232	5.0E-05	2.7933E-08
71	0.0539	3.0111E-05	233	2.3300	1.3017E-03
73	0.112	6.2569E-05	267	0.0010	5.5865E-07
84	0.3776	2.1095E-04	169	0.0300	1.6759E-05
24	1.2240	6.8379E-04	176	0.0050	2.7933E-06
PNT34	0.0185	1.0335E-05	177	0.0440	2.4581E-05
PNT57	0.0010	5.5865E-07	180	0.0260	1.4525E-05
PNT59	0.0015	8.3789E-07	183	0.0200	1.1173E-05
53	0.0050	2.7933E-06	184	0.3420	1.9106E-04
PNT307	0.0020	1.1173E-06	185	7.2000	4.0223E-03
PNTG	0.0103	5.7541E-06	210	0.0740	4.1340E-05
	5.0E-05	2.7933E-08	213	0.0890	4.9720E-05
102A	0.0200	1.1173E-05	216	0.0030	1.6759E-06
	5.0E-05	2.7933E-08	217	0.0720	4.0223E-05
	5.0E-05	2.7933E-08	221	0.1000	5.5865E-05
154	0.0100	5.5865E-06	222	0.1110	6.2011E-05
	5.0E-05	2.7933E-08	224	1.5760	8.8044E-04
142	0.0100	5.5865E-06		5.0E-05	2.7933E-08
160	0.0100	5.5865E-06	272	0.0790	4.4134E-05
186	0.1600	8.9385E-05	293	0.1139	6.3631E-05
188	5.0E-05	2.7933E-08	295	0.0080	4.4692E-06
189	0.0210	1.1731E-05	246	0.0580	3.2402E-05
199	0.0010	5.5865E-07		5.0E-05	2.7933E-08
			323B	3.2500	1.8156E-03



Tabla 4 Concentraciones en suelo y agua para Tolueno*

Punto de Muestreo	Tolueno En suelo mg/kg	Tolueno En agua mg/L	Punto de Muestreo	Tolueno En suelo mg/kg	Tolueno En agua mg/L
2	0.0035	6.7034E-06	PNT41	0.0049	9.3155E-06
7	0.0075	1.4258E-05	PNT44	0.0020	3.8022E-06
12	0.0060	1.1406E-05	PNT46	0.0030	5.7034E-06
13	0.0097	1.8441E-05	PNT47	0.0020	3.8022E-06
17	0.0127	2.4144E-05	PNT48	0.0014	2.6616E-06
17A	0.0280	5.3231E-05	PNT49	0.0045	8.5551E-06
19	0.0021	3.9924E-06	PNT50	0.0020	3.8022E-06
24	0.006	1.1406E-05	PNT51	0.0030	5.7034E-06
37	0.0033	6.2737E-06	PNT52	0.0010	1.9011E-06
38	0.1310	0.00029049	PNT54	0.0038	7.2243E-06
43	0.0060	1.1406E-05	PNT55	0.0010	1.9011E-06
47	0.0030	5.7034E-06	PNT56	0.0020	3.8022E-06
48	0.0090	1.7110E-05	PNT57	0.0050	9.5057E-06
49	0.0050	9.5057E-06	53	0.0300	5.7034E-05
60A	0.0050	9.5057E-06	85	0.0044	8.3650E-06
63	0.0020	3.8022E-06	PNT306	0.0020	3.8022E-06
54	0.0035	6.6539E-06	PNT307	0.0040	7.6045E-06
56	0.0050	9.5057E-06	20A	0.0019	3.6121E-06
61	0.0030	5.7034E-06	55	0.0050	9.5057E-06
68	0.0295	5.6083E-05	403	0.0050	9.5057E-06
70	0.0022	4.1825E-06	102	0.0600	1.1406E-04
73	1.698	0.00323	109	0.0040	7.6045E-06
74	0.0075	1.4258E-05	320	0.0170	3.2319E-05
75	0.0044	8.3650E-06	124	0.0048	9.1254E-06
79	0.0039	7.4144E-06	134	0.0010	1.9011E-06
80	0.0042	7.9847E-06	113	0.0050	9.5057E-06
82	0.0050	9.5057E-06	150	0.0500	9.5057E-05
84	2.7378	5.2049E-03	154	0.0200	3.8022E-05
28	0.0074	1.4068E-05	155	0.0140	2.6616E-05
PNT32	0.0048	9.1254E-06	133	0.0030	5.7034E-06
PNT33	0.0065	1.2357E-05	135	0.0015	2.8517E-06
PNT34	0.0056	1.0646E-05	136	0.0001	1.9011E-07
PNT35	0.0001	1.9011E-07	145	0.0110	2.0912E-05
PNT36	0.0050	9.5057E-06	146	0.0001	1.9011E-07
PNT40	0.0048	9.1254E-06	148B	0.0030	5.7034E-06



Tabla 5 Coordenadas del Sitio en estudio (Parámetros requeridos por Modflow)

Área Desplegada (m)	
X1	619115.8
Y1	2460685
X2	624194.1
Y2	2465272
Origen (m)	
Y	620520.028
X	2461272.97
Angulo	0
Esquinas (m)	
X1	620828
Y1	2461120
X2	623828
Y2	2465120

Tabla 5.1 Una sola capa $Z_{\min}=0$ $Z_{\max}=25$

Stop time (días)	River Stage (m)	Riverbed Bottom (m)	Riverbed Tthickness (m)	Riverbed Kz (m/s)
7300	19	15	4	$1e-4$

Tabla 5.2 Cargas equipotenciales (Head Equipotentials)

Izquierda				Derecha			
Start Time (días)	Stop time (días)	Start Time Head (m)	Stop Time Head (m)	Start Time (días)	Stop time (días)	Start Time Head (m)	Stop Time Head (m)
0	7300	2.5	22.5	0	7300	19	19



Tabla 6 Pozos de Bombeo para Benceno (Seleccionados de los 58 pozos CFE)

Pozo CFE	Nivel Freático (m)	Caudal Q (m ³ / 8hrs)	Screen Bottom	Screen Top	X	Y	Z
14	1.30	12.96	3.76	22.30	622980.52	2463734.92	3.403
40	1.36	14.40	1.73	22.01	623423.37	2463133.23	3.334
47	1.22	14.40	8.09	21.85	623789.68	2462662.75	2.893

Tabla 6.1 Piezómetros y Puntos de Muestreo para el Benceno

Nombre del Pozo	Coordenada X	Coordenada Y	Nivel Estático (m)	Nivel (Screen Elevation)	Tiempo (días)	Conc. Benceno (mg/L)
P 163	623241	2462103	1.64	21.36	0	0
P 163	623241	2462103	1.64	21.36	730	0.8
P 163	623241	2462103	1.64	21.36	1460	1.7
P 163	623241	2462103	1.64	21.36	2190	3.1
P 163	623241	2462103	1.64	21.36	2920	4.0
P 163	623241	2462103	1.64	21.36	3650	5.15
PM 323 B	623426	2462022	1.20	21.81	730	0.2
PM 323 B	623426	2462022	1.20	21.81	1460	0.55
PM 323 B	623426	2462022	1.20	21.81	2190	1.3
PM 323 B	623426	2462022	1.20	21.81	2920	2.2
PM 323 B	623426	2462022	1.20	21.81	3650	3.25
PM 293	623392	2463128	0.95	22.42	730	0
PM 293	623392	2463128	0.95	22.42	1460	0.01
PM 293	623392	2463128	0.95	22.42	2190	0.05
PM 293	623392	2463128	0.95	22.42	2920	0.08
PM 293	623392	2463128	0.95	22.42	3650	0.1139

Concentración de Recarga 0.4 mg/L y 3.2 mg/L

Concentración inicial 0.4 mg/L y 3.2 mg/L

Tabla 7 Pozos de Bombeo para Tolueno (Seleccionados de los 58 pozos CFE)

Pozo CFE	Nivel Freático (m)	Caudal Q (m ³ / 8hrs)	Screen Bottom	Screen Top	X	Y	Z
26	2.55	14.40	7.07	20.37	623734	2462279	3.085
47	1.22	14.40	8.09	21.85	623789	2462663	2.893
53	1.82	14.40	7.58	21.16	623781	2462457	2.854

Tabla 7.1 Piezómetros y Puntos de Muestreo para el Tolueno

Nombre del Pozo	Coordenada X	Coordenada Y	Nivel Estático (m)	Nivel (Screen Elevation)	Tiempo (días)	Conc. Benceno (mg/L)
PM 295	623616	2462750	1.10	21.97	0	0
PM 295	623616	2462750	1.10	21.97	730	0.01
PM 295	623616	2462750	1.10	21.97	1460	0.022
PM 295	623616	2462750	1.10	21.97	2190	0.065
PM 295	623616	2462750	1.10	21.97	2920	0.080
PM 295	623616	2462750	1.10	21.97	3650	0.11
PM 242	623565	2462195	1.30	21.65	730	0
PM 242	623565	2462195	1.30	21.65	1460	0.005
PM 242	623565	2462195	1.30	21.65	2190	0.008
PM 242	623565	2462195	1.30	21.65	2920	0.01
PM 242	623565	2462195	1.30	21.65	3650	0.2
PM 293	623392	2463128	1.0	22.37	730	0
PM 293	623392	2463128	1.0	22.37	1460	0
PM 293	623392	2463128	1.0	22.37	2190	0
PM 293	623392	2463128	1.0	22.37	2920	0
PM 293	623392	2463128	1.0	22.37	3650	0.0133

Concentración de Recarga 0.1 mg/L y 0.3 mg/L

Concentración inicial 0.1 mg/L y 0.3 mg/L



Tabla 8 Pozos de Bombeo para Vanadio (Seleccionados de los 58 pozos CFE)

Pozo CFE	Nivel Freático (m)	Caudal Q (m ³ / 8hrs)	Screen Bottom	Screen Top	X	Y	Z
26	2.55	14.40	7.07	20.37	623734	2462279	3.085
29	0.93	11.52	7.083	23.08	623470	2462076	3.029
36	0.78	7.2	8.91	22.79	622993	2461682	2.590
37	2.42	12.96	9.05	20.75	623228	2461767	2.713

Tabla 8.1 Piezómetros y Puntos de Muestreo para el Vanadio

Nombre del Pozo	Coordenada X	Coordenada Y	Nivel Estático (m)	Nivel (Screen Elevation)	Tiempo (días)	Conc. Benceno (mg/L)
P 240	623466	2462972.7	0.55	22.58	0	0
P 240	623466	2462972.7	0.55	22.58	730	0.09
P 240	623466	2462972.7	0.55	22.58	1460	0.25
P 240	623466	2462972.7	0.55	22.58	2190	0.312
P 240	623466	2462972.7	0.55	22.58	2920	0.365
P 240	623466	2462972.7	0.55	22.58	3650	0.406
P 245	623613	2462346	0.82	22.12	730	0
P 245	623613	2462346	0.82	22.12	1460	0.06
P 245	623613	2462346	0.82	22.12	2190	0.12
P 245	623613	2462346	0.82	22.12	2920	0.20
P 245	623613	2462346	0.82	22.12	3650	0.229
P 323J	623500	2461984	0.46	22.70	730	0
P 323 J	623500	2461984	0.46	22.70	1460	0
P 323 J	623500	2461984	0.46	22.70	2190	0
P 323 J	623500	2461984	0.46	22.70	2920	0
P 323 J	623500	2461984	0.46	22.70	3650	0.095

Concentración de Recarga 0.1 mg/L y 5.0 mg/L

Concentración Inicial 0.1 mg/L y 4.4 mg/L


Tabla 9 Pozos de Bombeo para Hierro (Seleccionados de los 58 pozos CFE)

Pozo CFE	Nivel Freático (m)	Caudal Q (m ³ / 8hrs)	Screen Bottom	Screen Top	X	Y	Z
39	1.26	11.52	0.78	22.25	623359	2463248	3.374
40	1.36	14.40	1.72	22.01	623423	2463133	3.334
42	1.93	11.52	3.39	21.20	623509	2462979	3.314
43	1.83	12.96	9.98	21.92	623609	2462798	3.209

Tabla 9.1 Piezómetros y Puntos de Muestreo para el Hierro

Nombre del Pozo	Coordenada X	Coordenada Y	Nivel Estático (m)	Nivel (Screen Elevation)	Tiempo (días)	Conc. Benceno (mg/L)
P160	623148	2461923	1.81	21.35	0	0
P160	623148	2461923	1.81	21.35	730	10
P160	623148	2461923	1.81	21.35	1460	30
P160	623148	2461923	1.81	21.35	2190	59
P160	623148	2461923	1.81	21.35	2920	72
P160	623148	2461923	1.81	21.35	3650	92.42
P 249	623539	2462513	1.16	21.83	730	0
P 249	623539	2462513	1.16	21.83	1460	1
P 249	623539	2462513	1.16	21.83	2190	3
P 249	623539	2462513	1.16	21.83	2920	8
P 249	623539	2462513	1.16	21.83	3650	10.96
P 279	623743	2462444	1.15	21.83	730	0
P 279	623743	2462444	1.15	21.83	1460	0
P 279	623743	2462444	1.15	21.83	2190	0
P 279	623743	2462444	1.15	21.83	2920	0
P 279	623743	2462444	1.15	21.83	3650	5.64

Concentración de Recarga 100 mg/L y 140 mg/L

Concentración inicial 100 mg/L y 140 mg/L

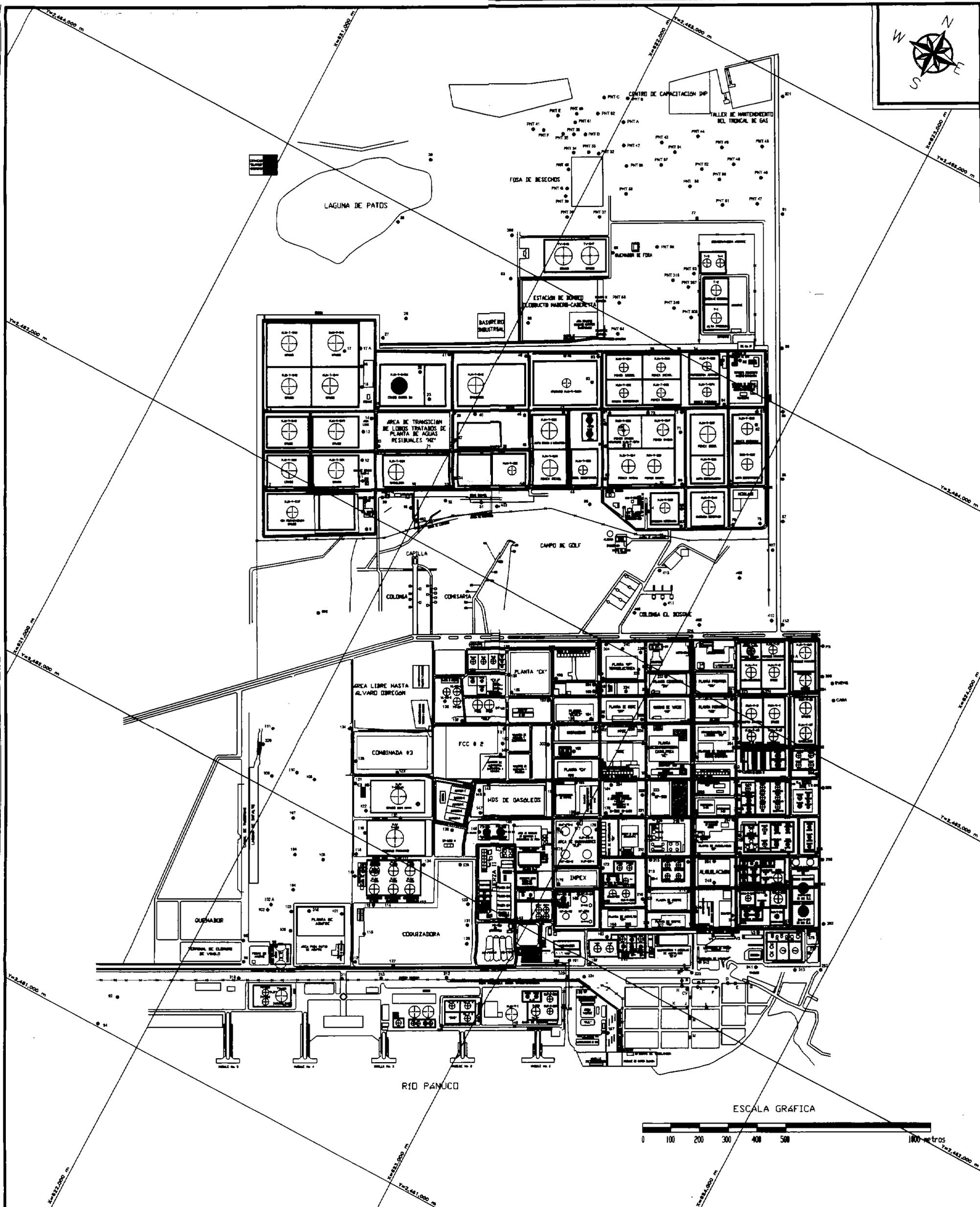
*Iturbe, R.; Flores, C.; Flores, R. M.; Chávez C.; Rodríguez, R. D.; Ramírez, A.; Rocha, M.; Perez, G.; Flores, J. (1999), Grupo: Saneamiento de suelos y acuíferos, Instituto de Ingeniería,

"Evaluación de la contaminación y niveles de limpieza requeridos en subsuelo y acuíferos de la refinería Francisco I Madero, en Tamaulipas".



ANEXO B

Plano de puntos de Muestreo del sitio en estudio



EVALUACIÓN DE LA CONTAMINACIÓN DEL SUBSUELO EN LA REFINERÍA FCO. I MADERO

PLANO:
1

UBICACIÓN DE LOS PUNTOS DE MUESTREO

● PUNTO DE MUESTREO

GRUPO DE INVESTIGACIÓN:
SANEAMIENTO DE SUELOS Y ACUÍFEROS