III.- Materials i Mètodes

6.- Estimació del nivell de contaminació en els medis: Model multi-compartamental

L'aire acostuma a ser el medi on es produeixen la gran majoria d'emissions, i per tant és on comença el transport i la distribució dels contaminants en els diferents medis. Els contaminants, una vegada en l'atmosfera, són dispersats depenent de les condicions meteorològiques i topogràfiques; podent ser transportats a llargues distàncies. Malgrat això, una part dels contaminants són depositats en el veïnat de la font emissora i arriben a altres medis com sòl, aigua o vegetació.

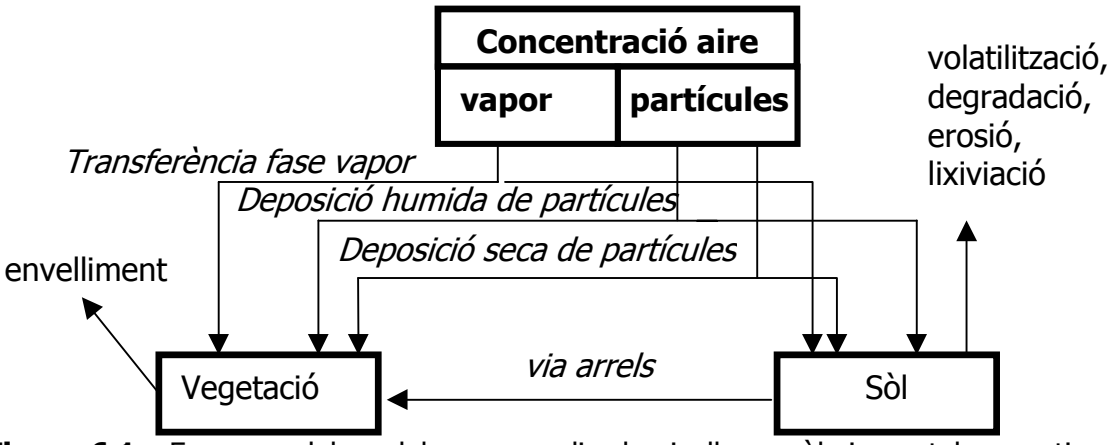

Figura 6.1.- Esquema del model per a predir els nivells en sòls i vegetals a partir d'emissions d'un contaminant.

Per a l'estudi de la dispersió de les emissions de dioxines i metalls pesants a l'aire s'ha aplicat el software "*BEEST for Windows 95*". Aquest programa de simulació proporciona una interfase gràfica pel model ISCT (Industrial Source Complex – Short Term, versió 3).

Per tal d'estimar la concentració dels contaminants en sòls i vegetació, donat que no existeix un model completament desenvolupat pel càlcul, va ser necessari l'adaptació de diverses metodologies, les quals ens van proporcionar una descripció realista de l'acumulació i pèrdues de contaminants en el medi ambient. Aquesta metodologia es va basar en els models presentats en les següents referències:

- Methodology for Assessing Health Risks Associated with Multiple Pathways of Exposure to Combustor Emissions (USEPA, 1998).

- Risk Assessment Technical Background Document for the Paint and Coatings Hazardous Waste Listing Determination (USEPA, 2001).

- Screening Level Ecological Risk Assessment Protocol for Hazardous Waste Combustion Facilities (USEPA, 1999).

6.1.- Dispersió dels contaminants a l'aire i model de deposició

La concentració d'aire i els fluxos de deposició molt sovint no poden ser mesurats, però poden ser estimats utilitzant un model de dispersió a l'aire, el qual simula la dispersió atmosfèrica utilitzant informació meteorològica i topogràfica de la regió considerada.

En aquest estudi, el model ISCST3 s'ha utilitzat per estimar:
- Concentració en aire de la fase particulada
- Concentració en aire de la fase vapor
- Deposició de la fase vapor
- Deposició seca de la fase particulada
- Deposició humida de la fase particulada

6.1.1.- Característiques del model ISCST3

L'ISCST3 es basa en un model de plomall Gausià. Aquest tipus de model és comú per calcular concentracions ambientals d'aire i fluxos de deposició a receptors específics localitzats a prop d'una font emissora estacionària. El model és capaç de simular la dispersió de contaminants des d'una font puntual, àrees, volums, i línies. Una descripció completa del model ISCST i dels seus algoritmes pot ser trobada al ISC3 User's Guide.

L'aplicació recomanada d'ISCST3 és predir les mitjanes anuals de concentracions d'aire i el flux de deposició a partir d'un o més anys de dades meteorològiques.

El model ISCST3 és aplicable a àrees simples i intermèdies, com també a terrenys complexes. Una àrea és classificada com a terreny complex si l'elevació dels receptors està per sobre de l'alçada de la font emissora. Addicionalment, el model permet la distinció entre regions rurals i urbanes. Els receptors són normalment especificats en coordenades polars o cartesianes. La distancia des de la font no ha d'excedir els 50 Km.

Els resultats del model de dispersió depenen de quatre dades bàsiques:
- Condicions meteorològiques
- Característiques de la font emissora
- Situació dels edificis contigus a la font emissora
- Situació dels receptors (distància a la font emissora i elevació del terreny)

6.1.2.- Condicions meteorològiques

Per tal de calcular la dispersió dels contaminants a l'atmosfera, el model ISCST3 requereix les següents dades meteorològiques en forma horària:

- Velocitat i direcció del vent
- Temperatura ambient
- Classe d'estabilitat atmosfèrica
- Alçada de mescla rural i urbana

Per altra banda, per tal de poder calcular els fluxos de deposició seca i humida, es requereix la següent informació addicional:

- Velocitat de fricció
- Longitud Monin Obukhov
- Longitud de la rugositat de la superfície
- Codi de precipitació

Una avaluació sobre el model ISCST3 al 1995 va mostrar la gran importància en la modelització de la dispersió de contaminants a l'aire, de la utilització de dades meteorològiques *onsite*.

6.1.3.- Característiques de la planta

Les característiques de la font emissora tenen una gran importància sobre els resultats de la dispersió dels contaminats a l'aire. Per una part, les dimensions de la xemeneia, alçada i diàmetre intern, i la seva localització. Per altra, les característiques físiques de la corrent de sortida, tals com la temperatura de sortida, la velocitat de sortida, o la velocitat volumètrica, són dades requerides per a poder realitzar una simulació amb el model ISCST3.

Les emissions de dioxines es troben distribuïdes en fase vapor i particulada, amb la peculiaritat de que cada congènere presenta una distribució diferent. Per tant, per a les dioxines s'ha simulat la seva dispersió considerant la seva distribució en fase gasosa i fase particulada. En canvi, els metalls pesants es troben adherits a les emissions de partícules, excepte el mercuri que es troba en fase vapor. Així, va ser suficient modelar la dispersió de partícules per als metalls pesants, excepte per al mercuri que es va simular la fase vapor.

6.1.4.- Depleció del plomall i deposició

Els contaminants són retirats de l'atmosfera per mitjà del procés de deposició, i arriben a les superfícies terrestres i aquàtiques. Per tant, la deposició dels contaminants porten una reducció d'aquests compostos a l'atmosfera. El model de

dispersió (ISCST3) en la seva simulació considera aquesta reducció de particules del plomall deguda a la deposició de partícules, mentre aquesta es troba viatjant.

El model ISCST3 inclou algoritmes, els quals tenen en compte aquest procés del plomall tant sec com humit. Aquests algoritmes calculen la disminució de la concentració atmosfèrica en dependència amb la topografia de la regió. Per tant, un arxiu de la xarxa del terreny va ser introduït en el model, incloent-hi tota la informació topogràfica de l'àrea d'estudi.

La deposició seca de partícules és un procés físic resultat de les forces de gravetat, de la difusió molecular i de les turbulències. Per al càlcul de la deposició seca, s'ha necessitat una distribució de la mida de partícules i de la seva relativa distribució, així com la densitat de partícules en les emissions.

La deposició humida és un procés d'eliminació de partícules i gasos de l'atmosfera a través de la precipitació. Per tal de poder calcular les quantitats dipositades va ser precís introduir el coeficient de rentat per pluja. Aquest coeficient en les partícules depèn solament de la mida d'aquestes. En el present estudi, els valors utilitzats han estat els proposats per l'ISC3 User'S Guide. Per altra banda, el coeficient de rentat per a gasos és un valor específic de cada substància, representant la influència, ex., solubilitat i reactivitat (Taula 6.1.).

Taula 6.1.- Distribució de mida de partícules i coeficient de rentat

Diàmetre (µm)	**Fracció de massa**	**Coeficient de rentat** (h/s-mm)
1	0.2096	0.50E-04
1.5	0.1543	0.70E-04
2	0.2179	1.40E-04
3	0.1591	2.20E-04
4	0.0821	2.80E-04
6	0.1096	4.20E-04
8	0.0369	5.20E-04
12	0.0155	6.70E-04
16	0.0082	6.70E-04
24	0.0045	6.70E-04
32	0.0021	6.70E-04
48	0.0002	6.70E-04
Vapor		1.70E-04

6.2.- Càlcul de concentració al sòl

La concentració de contaminants al sòl ha estat el resultat de processos tals com la deposició de partícules seca i humida, la difusió de vapor al sòl, les pèrdues des del sòl degudes a lixiviació, arrossegament per aigües superficials, volatilització, erosió del sòl, i degradació abiòtica i biòtica. Les característiques del sòl com pH, estructura, contingut de matèria orgànica i contingut d'aigua, afecten la distribució i mobilitat dels contaminants una vegada s'han dipositat en el sòl.

Així, podem dir que la concentració acumulada als sòls deriva de la deposició i la difusió durant el temps de vida de la font emissora, i de la velocitat de pèrdua del contaminant del sòl.

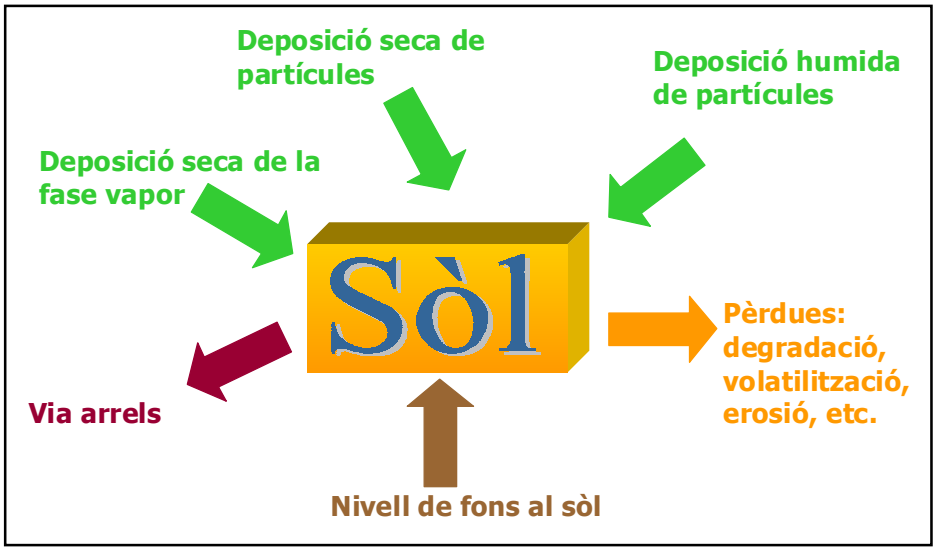

Figura 6.2.- Esquema de les vies que contribueixen a la concentració de contaminants en sòls.

Les principals suposicions considerades en el model que es va utilitzar per a calcular la concentració de contaminant acumulada al sòl són:

1.- Els contaminants en nivells traça s'assumeix que es poden conservar indefinidament en la capa superior del sòl, al menys que la constant de pèrdua sigui disponible. Encara que molts dels metalls pesants es troben enllaçats molt fortament al sòl, les mesures experimentals mostren que aquesta suposició sobre-prediu la concentració (ex., a baixos pH els metalls incrementen la seva mobilitat i per tant poden ser lixiviats de les capes superiors dels sòls).

2.- Els processos de pèrdua que ocorren simultàniament no són considerats. Aquesta suposició porta a una sobre-predicció de les pèrdues perquè la concentració de contaminant disponible per a cada procés de pèrdua serà sobre-predita.

3.- La degradació dels contaminants es considerada com una reacció de primer-ordre. Aquesta suposició pot sobre- o sub-valorar la velocitat de degradació, la qual és un procés complex i no necessàriament de primer-ordre.

D'aquesta manera definim la concentració acumulada de contaminació al sòl (C_s), durant el funcionament de la planta de la següent manera:

$$C_s = C_{sdp} + C_{sv} - C_{sa}$$

C_s - concentració acumulada a la capa superior del sòl (ppm)
C_{sdp} - concentració al sòl deguda a la deposició de la fase particulada (ppm)
C_{sv} - concentració al sòl deguda a la deposició de la fase vapor (ppm)
C_{sa} - concentració al sòl deguda a les arrels (ppm)

La pèrdua de contaminant des del sòl deguda als processos de lixiviació, arrossegament d'aigües superficials, volatilització, erosió i degradació, és un terme que es troba inclòs dintre de l'algoritme de càlcul de la concentració al sòl deguda a la deposició de la fase particulada i de la fase vapor.

6.2.1.- Concentració de contaminant al sòl deguda a la deposició de la fase particulada

La concentració de contaminant deguda a la deposició de partícules s'ha considerat com la suma de la concentració deguda a la deposició seca i a la deposició humida, i es calcula mitjançant el següent algoritme,

$$C_{sdp} = \frac{(D_{sp} + D_{hp})}{k_s \cdot BD \cdot Z_s}\left(1 - \exp(-k_s \cdot t_D)\right)$$

C_{sdp} - concentració al sòl deguda a la deposició de la fase particulada (µg/g)
D_{sp} - deposició seca de partícules (g/m²-any)
D_{hp} - deposició humida de partícules (g/m²-any)
k_s - constant de pèrdua (any^{-1})
BD - densitat del sòl (g/cm³)
Z_s - profunditat de la barreja del sòl (cm)
t_D - període de deposició (any)

S'ha considerat una deposició continua i constant durant tot el període de funcionament de la planta.

- *Constant de pèrdua, Ks*

Els contaminants, una vegada dipositats, poden ser eliminats del sòl per diferents processos que poden ocorre simultàniament. La constant de pèrdua (K_s) expressa la velocitat a la qual una substància química és eliminada del sòl, considerant processos físics, químics i biològics. Això inclou lixiviació, arrossegament per aigües superficials, volatilització, erosió, i degradació biòtica i abiòtica.

S'ha suposat que les pèrdues depenen solament de la concentració del contaminant en el sòl, i que al llarg del temps una fracció constant de contaminant és eliminada del sòl. Altrament, les reaccions entre els contaminants no s'han considerat.

La constant de pèrdua de contaminants del sòl s'ha determinat mitjançant la suma de la pèrdua de contaminant per a cada procés considerat.

$$k_s = k_{sl} + k_{sr} + k_{sv} + k_{se} + k_{sg}$$

k_s - contant de pèrdua del sòl (any^{-1})
k_{sl} - constant de pèrdua deguda a lixiviació (any^{-1})
k_{sr} - constant de pèrdua deguda a l'arrossegament per aigües superficials(any^{-1})
k_{sv} - constant de pèrdua deguda a volatilització (any^{-1})
k_{se} - constant de pèrdua deguda a erosió (any^{-1})
k_{sg} - constant de pèrdua deguda a degradació biòtica i abiòtica (any^{-1})

- *Constant de pèrdua deguda a lixiviació (k_{sl})*

Aquest procés consisteix en el moviment vertical descendent de contaminants a través d'una columna de sòl a les aigües subterrànies. Depèn de la solubilitat en aigua del contaminant i del contingut d'aigua en el sòl, i per tant de la precipitació, irrigació, evapo-transpiració, etc.

$$k_{sv} = \frac{(R_n + I - Ev - RO)}{\theta_{sw} \cdot Z_s} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{BD \cdot k_{ds}}{\theta_{sw}}\right)}$$

k_{sl} - contant de pèrdua deguda a lixiviació (any^{-1})
R_n - precipitació mitjana anual (cm/any)
I - irrigació mitjana anual (cm/any)
Ev - evapotranspiració mitjana anual (cm/any)
RO - superfície d'aigua mitjana anual arrossegada (cm/any)
θ_{sw} - contingut volumètric d'aigua en sòl (ml/cm^3 sòl)
Z_s - profunditat de la barreja del sòl (cm)
BD - densitat del sòl (g/cm^3)
k_{ds} - coeficient de partició sòl-aigua (ml/g)

- *Constant de pèrdua deguda a l'arrossegament per aigües superficials (k_{sr})*

El procés d'arrossegament per aigües superficials consisteix en el transport lateral dels contaminants amb el flux de la pluja, també en forma de partícules o en solució. Aquest procés depèn de les característiques del sòl i de la solubilitat del contaminant en aigua.

$$k_{sr} = \frac{RO}{\theta_{sw} \cdot Z_s} \cdot \frac{1}{\left(1 + \frac{BD \cdot k_{ds}}{\theta_{sw}}\right)}$$

k_{sr} - constant de pèrdua deguda a l'arrossegament d'aigües superficials (any^{-1})
RO - superfície anual mitjana d'aigua arrossegada (cm/any)
θ_{sw} - contingut volumètric d'aigua al sòl (ml/cm³ sòl)
Z_s - profunditat de la barreja del sòl (cm)
BD - densitat del sòl (g/cm³)
k_{ds} - coeficient de partició sòl-aigua (ml/g)

- *Constant de pèrdua deguda a la volatilització (K_{sv})*

Aquesta constant està basada en un coeficient d'equilibri de transferència de massa del sòl a la fase vapor. Aquesta constant depèn de la velocitat de moviment del contaminant en la fase vapor des de la superfície del sòl, i de la velocitat a la qual el contaminant és transportat per l'atmosfera. La volatilització d'un contaminant està influenciada per condicions medi ambientals, així com per la profunditat i la densitat del sòl. Les propietats químiques que afecten al procés de pèrdua són la constant de Henry (H), el coeficient de partició sòl-aigua, i el coeficient de difusió del contaminant a l'aire. Per altra banda, cal remarcar que H es va suposar zero per a tots els contaminant enllaçats a partícules.

La constant Ksv s'ha considerat com una constant de primer-ordre.

$$k_{sv} = \frac{3.1536 \cdot 10^{10} \cdot H}{Z_s \cdot BD \cdot k_{ds} \cdot R \cdot T} \cdot \frac{Da\ \left(1 - BD/\rho_s - \theta_{sw}\right)}{Z_s}$$

k_{sv} - contant de pèrdua deguda a la volatilització
H - constant de Henry (atm-m³/mol)
R - constant universal de gasos ($8.21*10^{-5}$ atm-m³/mol-K)
T - temperatura ambient de l'aire (K)
D_a - difusivitat del contaminant en l'aire (cm²/s)
θ_{sw} - contingut volumètric d'aigua en sòl (ml/cm³ sòl)
Z_s - profunditat de la barreja de sòl (cm)
BD - densitat del sòl (g/cm³)
ρ_s - densitat de partícules solides (g/cm³)
k_{ds} - coeficient de partició sòl-aigua (ml/g)

- *Constant de pèrdua deguda a l'erosió (k_{se})*

Les pèrdues de contaminant degudes a l'erosió, venen determinades pel terreny. Podem dir que existeixen molts factors que descriuen l'erosió del contaminants al sòl: relació de distribució de sediments, relació d'enriquiment de contaminants, factor d'erosivitat, topografia i factor de pendent, etc.

- *Constant de pèrdua deguda a la degradació (k_{sg})*

Els processos químics i biològics de pèrdua de contaminant inclouen biodegradació (ex., microbial), descomposició química (ex., hidròlisis, reaccions redox, fotolisis). La pèrdua per degradació és un procés específic de cada substància, i no és aplicable a

molts metalls, els quals poden ser transformats però no degradats. La pèrdua de contaminants del sòl degut al procés de degradació i volatilització, està basada en observacions de camp o en dades empíriques.

Degradació biòtica

La proporció de degradació biològica en sòl depèn de la concentració i activitat de la població microbial, les condicions del sòl, i la concentració del contaminant. Les velocitats de pèrdua de primer-ordre, sovint no tenen en compte l'alta variabilitat d'aquests paràmetres. Malgrat això, la utilització d'expressions simples és addient per a concentracions baixes de contaminant (ng/kg).

La velocitat de la degradació biològica de contaminants és especifica per a cada compost químic, depenen de la seva complexitat i de la seva disponibilitat als microorganismes. Alguns substrats són co-metabolitzats; és a dir, no són utilitzats per l'organisme com nutrients o com a fonts d'energia. Sofreixen transformacions simples amb altres compostos similars de forma que ja no poden ser utilitzats. Els factors medi ambientals i químics que poden limitar la biodegradació dels contaminants en el medi ambient del sòl són la disponibilitat del contaminant, les limitacions del nutrient, la toxicitat del producte, i la inactivació o no-existència de l'enzim capaç de degradar-lo.

Degradació abiòtica

La degradació química i fotodegradació dels compostos orgànics pot ser un mecanisme important d'eliminació en el sòl. Les reaccions d'hidròlisi i oxidació-reducció (redox) són les principals transformacions químiques que poden tenir lloc a les capes superiors dels sòls.

En sistemes aquosos, la hidròlisi es caracteritza per tres reaccions: catàlisi àcida, catàlisi bàsica, i reaccions neutres (e.x., H^+, OH^-, i H_2O hidròlisi catalitzada). La velocitat total de la hidròlisi és la suma de les reaccions de primer ordre d'aquests processos.

6.2.2.- Concentració de contaminant al sòl deguda a la deposició de la fase vapor

La contaminació al sòl deguda a la deposició de la fase gasosa es deu a la deposició de la fase vapor, i és governada per la transferència de massa de la fase-vapor.

$$C_{sv} = \frac{D_v}{k_s \cdot BD \cdot Z_s}\left(1 - \exp(-k_s \cdot t_D)\right)$$

C_{sv} - concentració al sòl deguda a la deposició de la fase vapor (µg/g)
D_v - deposició de la fase gas (g/m²-any)

k_s - constant de pèrdua (any^{-1})
BD - densitat del sòl (g/cm³)
Z_s - profunditat de la barreja de sòl (cm)
t_D - període de deposició (any)

6.3.- Càlcul de la concentració als vegetals

Els contaminants poden passar d'un medi ambiental a un altre (aire, sòl, aigua) i arribar a l'home a través de la cadena alimentària. Poden ser acumulats en fruites i vegetals, que són consumits directament pels individus. Altrament, els animals que creixen en l'àrea contaminada són alimentats amb ensitjament i farratge, que poden ser conreats a l'àrea d'estudi, i subseqüentment arribar als humans.

Dins els algoritmes, per a calcular la concentració en vegetals hi trobem tres tipus de paràmetres. La primera classe inclou les concentracions mitjanes o quantitats que han estat calculades utilitzant altres models d'aquesta avaluació. Específicament, la concentració en sòl, aire, i la deposició l'atmosfèrica han estat calculades utilitzant les aproximacions descrites als apartats anteriors. La segona classe inclou els paràmetres que són específics del contaminant, ex., el factor de bioconcentració/biotransferència. A la tercera i ultima classe corresponen els paràmetres físics generals no relacionats amb el contaminant.

És important entendre que els algoritmes per estimar les concentracions de contaminació en vegetals són models senzills. Algunes de les suposicions generals preses en el nostre model són les següents:

1.- El flux de la font emissora romandrà constant amb el temps. Les fonts per a impactes terrestres inclouen el flux de deposició i la concentració en aire predita mitjançant el model de dispersió en l'aire. La suposició d'una font constant també es va fer servir en el model de dispersió, el qual prediu el flux de deposició mitjà per a un període llarg, i les concentracions en aire.

2.- La concentració a les plantes ha estat calculada com una funció de la deposició de contaminants que han estat emesos des d'una font emissora. A més a més, es considera el component d'exposició mitjançant les arrels i la translocació. No es consideren la resuspensió i redeposició dels contaminants que han estat dipositats en el sòl. Els fenòmens de resuspensió/redeposició poden ocorre on processos tals com tilatge, erosió del vent, resuspensió vehicular, i/o "rainsplash". Hi ha models disponibles per tal d'estimar l'impacte en plantes d'aquests processos. Tanmateix, no han estat considerats en el present estudi.

Els mecanismes pels quals els contaminants poden ser bioacumulats en plantes són:

- absorció de la fase vapor per la planta

- deposició de la fase particulada dels contaminants
- exposició per les arrels

La importància relativa de cada mecanisme depèn de les característiques de la planta i del contaminant. L'algoritme de càlcul inclou la relació superfície–àrea-volum (ex., plantes amb fulles grans probablement acumulen més que plantes amb fulles petites). Les característiques del contaminant inclouen el grau de distribució entre la fase gasosa i la particulada, i la persistència del contaminant en el medi ambient.

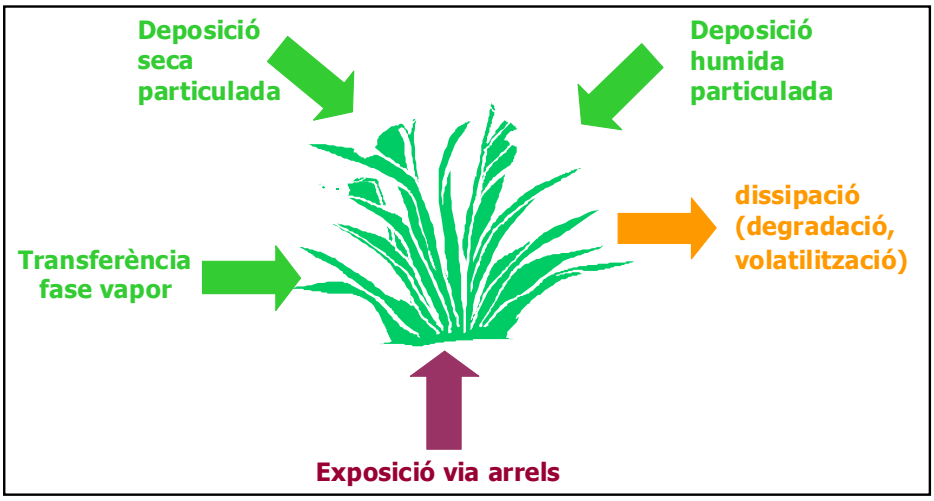

Figura 6.3.- Esquema de les vies que contribueixen a la concentració de contaminants en vegetals.

La concentració en vegetals s'obté a partir de la suma de les concentracions dels diferents mecanismes individuals,

$$C_{abv} = C_{vv} + C_{vdp} + C_{va}$$

C_{abv} - concentració acumulada als vegetals (ppm)
C_{vv} - concentració als vegetals deguda a l'absorció de la fase vapor (ppm)
C_{vdp} - concentració a vegetals deguda a la deposició de la fase particulada (ppm)
C_{va} - concentració als vegetals deguda a les arrels (ppm)

6.3.1.- Concentració de contaminant en la planta deguda a l'absorció de la fase-vapor per la planta

La deposició de la fase vapor a les plantes és un procés de partició conduït pel gradient potencial del compost entre l'atmosfera i les plantes. El model més simple que descriu aquest procés considera la planta com un compartiment homogeni únic que es troba en contacte amb l'aire (McLachlan, 1999).

La principal via d'acumulació de molts dels contaminants procedeix de la deposició sobre la superfície de les fulles. El grau al qual aquests contaminants s'acumulen en les fulles depèn de la distribució vapor-partícula en l'atmosfera, del coeficient octanol-aigua (K_{ow}), i de l'espècie de la planta. La concentració de lípids i l'àrea superficial de les fulles, pot a més a més influenciar en el grau d'acumulació.

L'algoritme per a calcular la transferència aire-planta considera la concentració en plantes deguda a la fase vapor, com una funció de la concentració en la fase vapor a l'aire, un factor de transferència i un factor empíric.

$$C_{vv} = \frac{B_{vpa} C_{va} VG_{ag}}{d_a}$$

C_{vv} - concentració deguda a l'absorció de la fase vapor (ppm)
B_{vpa} - factor de biotransferència aire-fulla (sense unitats)
C_{va} - concentració en aire en fase vapor (ng/m^3)
VG_{ag} - factor empíric de correlació
d_a - densitat de l'aire (kg/m^3)

El factor de correlació empíric (VG_{ag}) redueix la concentració en vegetals, considerant que B_{vpa} es va desenvolupar per a la transferència de contaminants aire-fulla, i no per una voluminosa extensió de vegetació.

Bacci *et al.,* (1990a, b) van portar a terme diferents experiments de laboratori sobre la transferència aire-fulla de la fase vapor. A partir dels resultats, van desenvolupar una relació empírica per al factor de bioconcentració (B_{vpa}) per a la fase vapor des de les fulles d'azalea. Es va trobar una correlació que relacionava la B_{vpa} amb la constant de partició octanol-aigua (K_{ow}) i el coeficient de partició aire-aigua (K_{aw}) dels compostos. El coeficient de partició aire-aigua, K_{aw}, és una forma adimensional de la constant de Henry (H), que pot ser obtinguda dividint H pel producte de la constant de gasos ideals (R) i la temperatura (T). La forma més general per al factor de transferència aire-fulla es mostra seguidament, i és expressada en unitats volumètriques:

$$\log B_{vol} = 1.065 \log K_{ow} - \log\left(\frac{H}{RT}\right) - 1.654$$

B_{vol} - factor de biotransferència aire-fulla (sense unitats)
K_{ow} - coeficient de partició octanol-aigua (sense unitats)
H - constant de Henry (atm m^3/mol)
R - constant dels gasos ideals (atm m^3/mol K)
T - temperatura ambient (K)

El factor de transferència volumètric (B_{vpa}) es calcula tenint en compte l'equació de Bacci *et al.,* (1992).

$$B_{vpa} = \frac{d_a B_{vol}}{DF_g Dl}$$

B_{vpa} - factor de biotransferència aire-fulla (sense unitats)
B_{vol} - factor volumètric de biotransferència aire-fulla (sense unitats)
DF_g - fracció de pes sec d'herbes (sense unitats)
Dl - densitat humida de les herbes (kg/m^3)

6.3.2.- Concentració de contaminant en la planta deguda a la deposició de partícules

Els contaminants són dipositats en les plantes mitjançant la deposició seca i humida de partícules. Els mecanismes de deposició seca i humida són els mateixos explicats anteriorment a l'apartat de càlcul de la concentració acumulada al sòl deguda a la deposició de partícules. La concentració de contaminants en les plantes deguda a la deposició pot ser calculada a partir de l'equació:

$$C_{vdp} = \frac{1000 \cdot \left(D_{sp} + F_w \cdot D_{hp}\right)}{k_p \cdot Y_p} \cdot R_p \left(1 - \exp(-k_p \cdot t_p)\right)$$

C_{vdp} - concentració als vegetals deguda a la deposició de partícules (µg/g p.s.)
D_{sp} - deposició seca de partícules (g/m²-any)
D_{hp} - deposició humida de partícules (g/m²-any)
F_w - fracció de deposició humida que s'adhereix a la superfície de la planta
k_p - constant de pèrdua de les plantes (any^{-1})
R_p - fracció interceptada per la superfície de la planta (sense unitats)
t_p - període d'exposició de la planta (any)
Y_p - factor de producció de vegetals (kg p.s./m²)

S'assumeix que tots els contaminants que estan en contacte amb la superfície de la planta com resultat de la deposició seca, romanen en les superfície fins que són remoguts pels processos de pèrdua. Una fracció de la deposició humida interceptada per la superfície de les plantes és adherida a la superfície, la resta s'assumeix que és eliminada per mitjà del rentat de la pluja.

Per altra banda, la fracció de contaminant interceptada per la superfície de la planta (R_p), pot ser definida com el factor el qual considera i mesura que no totes les partícules dipositades dins d'una unitat d'àrea seran dipositades, en un principi, en la superfície del vegetal. Els models desenvolupats per la "Nuclear Regulatory Commission" assumeixen que la fracció interceptada de partícules és d'un 20% tant per deposició seca com per a deposició humida (Boone *et al.,* 1981). Altrament, Shor *et al.,* (1982) suggereixen que la diversitat en el creixement de les plantes indica la necessitat d'una fracció d'intercepció específica per a cada planta. Baes *et al.,* (1984) presenten equacions per a calcular la intercepció per herbes de pastura, basades en unes relacions derivades empíricament.

Una vegada els contaminants han estat dipositats en la superfície de la planta, molts dels processos medi ambientals, tals com el moviment del vent, el moviment de l'aigua o el creixement i dilució, treballen per tal de reduir la quantitat de contaminant en la superfície de la planta. S'utilitza el coeficient de pèrdua com una mesura de la quantitat de contaminant eliminat per aquests processos al llarg del temps. Cal tenir en consideració que aquest paràmetre és probablement el més incert dels paràmetres necessaris per a mesurar la deposició de partícules en vegetals.

El temps d'exposició d'una planta és un factor constant que depèn del tipus de planta considerada. En el present estudi s'han considerat herbes comunes.

Per últim, el factor de producció de vegetals (Y_p), considera la quantitat de vegetals produïts en l'àrea d'estudi.

6.3.3.- Concentració de contaminant en la planta via arrels

Els contaminants poden entrar a les plantes per via de les arrels, on poden acumular-se o traslocar-se cap als nivells superiors de la planta. La concentració dels contaminants en els teixits de la planta deguda a l'exposició via arrels es pot calcular a partir de la concentració de contaminant i del factor de bio-transferència d'aquests.

La quantitat de contaminant que pot arribar a les plantes a través de les arrels des de un sòl contaminat depèn de la solubilitat del compost en aigua, de la constant de Henry, del coeficient de partició octanol-aigua, i de factors tals i com el contingut de matèria orgànica als sòls i l'espècie de la planta (Simonich i Hites, 1995).

Molts compostos orgànics lipofilics (K_{ow} més gran que aproximadament 10^{+4}), tals com les dioxines i dibenzofurans, es distribueixen en l'epidermis de les arrels, i no són arrossegats a l'interior d'aquestes. Malgrat tot, existeixen unes poques excepcions de vegetals, com el carbassó i la carabassa, que acumulen i a més a més són capaços de traslocar altes concentracions de PCDD/Fs des del sòl contaminat. Per aquestes espècies, l'arrel és la principal via d'exposició (Simonich i Hites, 1995). Tanmateix, per a la resta d'espècies estudiades, molts experiments d'exposició i estudis de camp han demostrat que l'exposició de compostos orgànics a través de les arrels, és una exposició pràcticament insignificant. En general, els contaminants lipofílics no són transportats dintre la planta, i el seu metabolisme no és significatiu.

Un model general que relaciona la concentració en sòl amb la concentració en plantes és el model simple sòl-planta desenvolupat per Travis i Arms (1988) i proposat també per la USEPA:

$$C_{va} = C_s \cdot B_r$$

C_{va} - concentració en la vegetació deguda a l'exposició via arrels (µg/g p.s.)
C_s - concentració al sòl (µg/g sòl)
B_r - factor de bioconcentració sòl-planta ([µg/g p.s. planta]/[µg/g sòl]).

El càlcul de la concentració en plantes degut a l'exposició via arrel depèn de les característiques del contaminant. El factor de bioconcentració sòl-planta (B_r) és una mesura de la tendència del contaminant a acumular-se en els teixits de la planta. Es defineix com la concentració del contaminant en la planta dividida per la concentració del contaminant en el sòl. Per tant, podem dir que aquest factor està directament relacionat amb la biodisponibilitat del contaminant al sòl.

7.- Avaluació de l'exposició

L'avaluació del risc requereix la identificació de les vies mitjançant les quals la població està exposada al contaminant. L'estimació del risc per la salut deguda a l'exposició a contaminants ha estat aquí considerada com la combinació de cinc vies diferents:

- Ingesta del sòl contaminat (Ings)
- Ingesta de vegetals de l'àrea (Ingv)
- Inhalació de partícules resuspeses (Inhp)
- Inhalació d'aire (Inh)
- Absorció dèrmica (Ads)

7.1.- Ingesta de sòl contaminat

Els contaminants, una vegada dipositats al sòl, poden ser ingerits pels humans per transferència mà-boca. Així, la població contínuament es troba ingerint petites quantitats de sòl accidentalment. L'exposició dels humans a través de la ingesta de sòl és veu afectada per la quantitat de sòl ingerida en un dia, per la concentració dels contaminants en el sòl, així com pel temps d'exposició.

La població pot trobar-se exposada als contaminants emesos immediatament després de la seva deposició al sòl, o abans de que els contaminants siguin incorporats en les capes més baixes del terra.

La gent es troba en contacte directe amb el sòl quan treballen a l'aire lliure o mentre realitzen feines al jardí. Per una banda, els treballadors a l'aire lliure es veuen exposats tot l'any mentre que part de la societat entra en contacte amb el sòl

quan treballa en els seus jardins o parcel·les. Per altra banda, la majoria de gent es veu exposada a través del sòl que es arrossegat pel vent des de jardins públics o privats. Es suposa que la gent treballa en els seus jardins o parcel·les solament durant els caps de setmana, això si el temps és bo, i si no tenen altres activitats. Per tant, així hem considerat aquí una exposició de dos dies per setmana durant ¾ parts de l'any.

La velocitat d'ingesta de sòl, depèn de l'edat dels individus i de l'activitat realitzada a l'aire lliure o a l'interior, així com de la freqüència de posar en contacte les mans amb la boca, així com de l'estació climàtica (USEPA, 1990).

D'aquesta manera la ingesta de sòl queda definida com segueix:

$$Ings = C_s \cdot CR_s \cdot AFI_s$$

Ings - ingesta de sòl (μg/d)
C_s - concentració del contaminant en sòl (μg/g sòl)
CR_s - velocitat d'ingesta dels sòls (g/d)
AFI_s - factor d'absorció d'ingesta de sòls

$$ADD_{Soil} = \frac{Ings \cdot EF_S}{1000 \cdot BW \cdot 365}$$

ADD_{Soil} - dosi diària mitjana d'ingesta de sòl (mg/kg-d)
BW - pes del cos humà (kg)
EF_S - freqüència de l'exposició amb sòl contaminant (d/any)

7.2.- Ingesta de vegetals de l'àrea

El consum diari de contaminants a través del consum de plantes, s'ha calculat per la multiplicació de la concentració de contaminant en els vegetals, per la quantitat de vegetals consumits diàriament, per la fracció de vegetals que es consumeix provenint directament de l'àrea d'estudi, i pel factor d'absorció del contaminant.

$$Ingv = Cp \cdot Fi \cdot CRp \cdot ABSp$$

Ingv - ingesta de vegetals de l'àrea (μg/d)
C_v - concentració del contaminant en els vegetals (μg/g p.h.)
F_i - fracció de plantes cultivades en l'àrea contaminada
CR_v - consum de vegetals (g p.h./d)
ABS_v - biodisponibilitat dels contaminants en els vegetals (sense unitats)

$$ADD_{Pi} = \frac{Ingv \cdot EF}{1000 \cdot BW \cdot 365}$$

ADD_{Pi} - dosi diària mitjana d'ingesta de vegetals (mg/kg-d)
BW - pes del cos humà (kg)
EF - freqüència de l'exposició amb vegetals de l'àrea (d/any)

L'avaluació de l'exposició a un contaminant a través del consum de vegetals, hauria de tenir també en consideració el factor de preparació del menjar; ja que una fracció dels contaminants pot ser perduda abans del seu consum al llarg de la preparació dels aliments i mentre s'estan cuinant. Els càlculs realitzats s'han basat en els vegetals en cru, sense cuinar.

7.3.- Inhalació de partícules resuspeses

Els contaminants una vegada han estat dipositats al sòl poden sofrir un procés de resuspensió de partícules del terra a l'atmosfera. Aquest procés pot ser degut per exemple al vent, o a la construcció i demolició d'edificis. Amb les partícules de pols, els contaminants adherits arriben a l'atmosfera, i són subseqüentment inhalats per la gent que viu o treballa en la zona d'estudi.

$$Inhp = C_{res} \cdot IR \cdot RET \cdot AFIn$$

Inhp - inhalació de partícules resuspeses (μg/d)
C_{res} - concentració en partícules resuspeses (μg/m^3)
IR - velocitat d'inhalació (m³/d)
RET - fracció retinguda als pulmons (sense unitats)
AFIn - factor d'absorció pulmonar

$$ADD_{res} = \frac{Inhp \cdot EF}{1000 \cdot BW \cdot 365}$$

ADD_{res} - dosi diària mitjana d'inhalació de partícules resuspeses des del sòl (mg/kg-d)
BW - pes del cos humà (kg)
EF - freqüència de l'exposició (d/any)

Hawley (1985) assumeix que el 50 % de la concentració de partícules a l'atmosfera, són partícules de pols resuspeses. Així, la concentració de contaminant en l'aire resuspesa del terra pot ser calculada a través del següent algoritme.

$$C_{res} = 10^{-6} \cdot C_s \cdot C_{pa} \cdot F_{res}$$

C_{res} - concentració de contaminant en les partícules resuspeses (μg/m³)
C_s - concentració del contaminant al sòl (μg/g)
C_{pa} - concentració de partícules a l'aire (μg/m³)
F_{res} - fracció de partícules resuspeses des del sòl

7.4.- Inhalació de l'aire

En el càlcul d'aquesta exposició es realitza la suposició de que les substàncies es distribueixen homogèniament a través dels medis (aire, aigua) i que el consum del compost és proporcional al consum del medi. Per tant, la dosi és la integració de la velocitat de consum d'un compost amb el temps. Així, la quantitat inhalada del contaminant depèn de la seva concentració atmosfèrica i de la velocitat d'inhalació.

Tant la concentració en fase vapor com en fase particulada, es considerarà inhalada pels receptors:

$$Inh = C_{air} \cdot IR \cdot RET \cdot AFIn$$

Inh - inhalació d'aire (μg/d)
C_{air} - concentració de contaminants en aire (μg/m³)
IR - velocitat d'inhalació (m³/d)
RET - fracció retinguda als pulmons (sense unitats)
AFIn - factor d'absorció pulmonar

$$ADD_{air} = \frac{Inh \cdot EF}{1000 \cdot BW \cdot 365}$$

ADD_{air} - dosi diària mitja d'inhalació d'aire (mg/kg-d)
BW - pes del cos humà (kg)
EF - freqüència d'exposició (d/any)

7.5.- Absorció dèrmica

El contacte dèrmic amb els contaminants presents en sòl és una ruta potencial d'exposició a les emissions del contaminant per a la població. L'absorció dèrmica s'assumeix que solament pot succeir en cas de contacte directe amb els contaminants. Els nens poden ser exposats a sòl contaminat quan juguen al terra, mentre que els adults es veuen exposats quan treballen al jardí o a la parcel·la. A l'igual que en l'exposició via ingesta de sòls, els treballadors a l'aire lliure es veuen exposats tot l'any, en canvi la resta de la gent es troba exposada durant un període limitat, (ex. caps de setmana). Per això, hem definit la freqüència de l'exposició de dos dies per setmana durant 9 mesos.

Per altra banda aquesta via d'exposició depèn principalment de la superfície de pell exposada (A), de la quantitat de sòl que s'adhereix a la pell (AF), de la concentració del contaminant en sòls (C_s) i de la fracció absorbida.

El factor d'absorció aplicat, inclou un factor d'absorció general (ABS_d) dels contaminants a través de la pell, i una reducció general de l'absorció dèrmica (AF) a causa dels efectes de la matriu causats per les característiques del sòls.

$$Ads = Cs \cdot AF \cdot A \cdot ABS_d \cdot CT$$

Ads - absorció dèrmica (μg/d)
C_s - concentració en sòls (μg/g sòl)
AF - factor d'adherència sòl-pell (mg/cm²)
A - superfície de pell exposada (cm²)
ABS_d - factor d'absorció dèrmica
CT - temps de contacte sòl-pell (h/d)

$$ADD_{derm} = \frac{Ads \cdot EF_S}{10^6 \cdot BW \cdot 365}$$

ADD_{derm} - dosi diària mitjana per absorció dèrmica de sòl (mg/kg-d)
BW - pes del cos humà (kg)
EF_s - freqüència de l'exposició – contacte amb sòl contaminat (d/any)

El factor d'absorció dèrmica (ABS_d) és la quantitat relativa de substància en la pell que penetra a través de l'epidermis al cos. L'ABS_d és una quantitat químic-específica que depèn de les propietats fisico-químiques del contaminant (solubilitat lipídica, mida molecular), i a la vegada es veu afectat per les característiques del sòl (mida de la partícula, contingut de carbó orgànic), característiques de la pell (edat, localització anatòmica, dany), factors físics (temperatura, humitat) i extensió de l'exposició (quantitat de sòl en la pell, duració del contacte del sòl amb la pell). Per tant hi ha una gran incertesa associada amb l'estimació del factor d'absorció dèrmica.

El factor d'adherència sòl-pell (AF) és definit com la quantitat de sòl acumulada en la pell en contacte dèrmic amb el sòl. L'adherència del sòl a la pell pot variar considerablement depenent de les condicions particulars de l'exposició. S'ha trobat que l'adherència incrementa a l'augmentar el contingut d'humitat i decreix amb l'augment de la mida de la partícula. En general, l'adherència més alta es dóna en treballadors a l'aire lliure, seguida per activitats de lleure (esportistes en un camp humit), i activitats de jardineria. Per altra banda, el factor clau és la roba, condicions sec/humit, i el nivell d'activitat. Les mans, genolls i el colze són les parts del cos amb una més alta adherència, mentre que la cara té la més baixa.

L'exposició dèrmica d'un contaminant és aproximadament proporcional a la superfície exposada. Per a l'exposició dèrmica no s'espera que es trobi la superfície total del cos exposada, sinó solament un percentatge de la superfície total. La USEPA (1992, 1995) ha reportat que la superfície exposada pot estar en el rang d'un 10% de la superfície total, quan l'exposició està limitada al cap i mans, i fins a un 25% de la superfície total quan cap, mans, avantbraç i panxell es consideren. Altrament, diferents estudis han suggerit que l'exposició pot també ocorre sota la roba (USEPA, 1992). Aquest tipus d'exposició no ha estat considerada en els escenaris descrits a dalt. Per això, la USEPA (1992, 1995) suggereix utilitzar el rang superior (25%) per tal d'obtenir una superfície de pell exposada al sòl per defecte.

8.- Caracterització de risc sobre la salut

La caracterització del risc sobre la salut humana és el pas final en el procés d'avaluació. El risc avalua la probabilitat de que un efecte advers sobre la salut

pugui ocorre després de l'exposició a una dosi determinada d'una substància definida, sent el resultat d'una combinació de perill i exposició a un contaminant.

El risc individual sobre la salut s'ha determinat per a cada contaminant dividit en dos: efectes cancerigens, i efectes no- cancerigens. Addicionalment, ambdós riscos es van distingir per la via d'exposició, ja que la inhalació i la ingesta oral no afecten als mateixos òrgans, i per tant tenen diferents nivells de referència.

8.1.- Risc cancerigen

El risc cancerigen expressa la probabilitat de patir un càncer degut a una exposició diària. El risc cancerigen no és un valor de tolerància, el que vol dir que fins i tot la dosi més baixa té una probabilitat finita, de generar una resposta cancerígena. Encara que el risc disminueix amb la dosi, aquest no arriba mai a ser zero fins que la dosi no arriba a ser zero (Figura 8.1). Per a la caracterització del risc cancerigen, els nivells específics d'exposició són comparats amb les corresponents cotes del contaminant rellevant. Els resultats corresponen així a la probabilitat de que un càncer pugui ocorre (ex., un valor de 10^{-6} significa que 1 persona entre un milió pot desenvolupar un càncer).

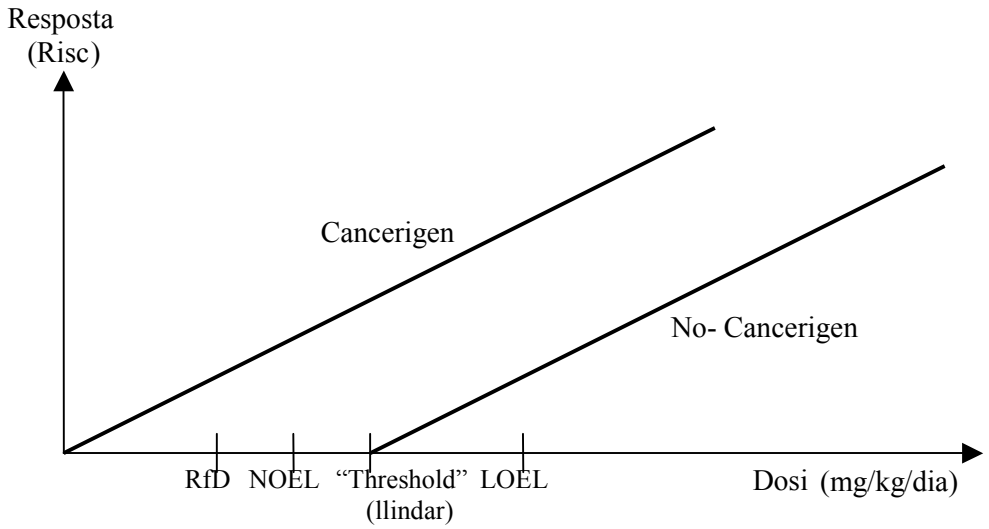

Figura 8.1.- Funcions dosi-resposta per a contaminants cancerigens i no-cancerigens

Al present treball, el risc cancerigen ha estat calculat com un excés de risc (ER); és a dir, no expressa el risc cancerigen total. Es tracta del risc incremental degut a l'exposició a les emissions aquí considerades.

L'exposició per inhalació i oral s'ha considerat separadament i per tant s'han requerit diferents valors de potències cancerigenes depenent de la via d'exposició.

El risc cancerigen oral ha estat determinat utilitzant el factor de pendent de càncer (CSF). El risc cancerigen per inhalació ha estat estimat mitjançant el factor unitat de risc per inhalació (URF). El factor de la pendent de càncer no representa un nivell d'exposició segur, sinó que relaciona l'exposició amb la probabilitat de patir efectes cancerigens.

No tots el metalls pesants tenen un potencial per causar càncer d'alguns no hi ha suficients estudis per a presentar un valor de referència. En aquest estudi, el risc cancerigen va ser estimat per a aquells contaminants pels que es van trobar disponibles valors de referència raonables.

El risc cancerigen descriu la probabilitat de desenvolupar un càncer al llarg del temps de vida, i per tant la duració de l'exposició d'un individu es considerada en l'avaluació del risc. En l'estudi present, es va suposar que la població residia en l'àrea d'estudi una mitjana de 55 anys, i per tant, durant aquests anys es trobaria exposada a les emissions tòxiques de la planta.

Taula 8.1.- Potencies cancerigenes dels diferents compostos estudiats.

$(mg/kg\ d)^{-1}$	**Factor d'unitat risc inhalació (URF)** *	**Factor de pendent risc oral (CSF)** *
I-TEQ	1.30E-5	1.30E-5
As	1.20E1	1.75
Cd	1.50E+1	3.80E-1
Cr	5.10E-2	-
Ni	9.10E-1	-

* OEHHA, (2002).

8.1.1.- Risc cancerigen per inhalació

El risc cancerigen per inhalació representa el risc degut a l'exposició a les emissions de la planta (e.x., inhalació d'aire contaminat o d'inhalació de partícules resuspeses).

$$ER_{inh} = ADD_{inh} \cdot URF_{inh} \cdot ED / AT \cdot 3500$$

ER_{inh} - excés de risc cancerigen per inhalació
ADD_{inh} - dosi diària per inhalació (mg/kg-d)
ED - duració de l'exposició (anys)
AT - temps de vida (anys)
URF_{inh} - factor unitat del risc per inhalació $(\mu g/m^3)^{-1}$

$$ADD_{inh} = ADD_{air} + ADD_{res}$$

ADD_{inh} - dosi diària per inhalació $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$
ADD_{air} - dosi diària per inhalació d'aire $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$
ADD_{res} - dosi diària per inhalació de partícules resuspeses des del sòl $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$

8.1.2.- Risc oral cancerigen

El risc oral cancerigen per al nostre estudi resulta principalment de la ingesta de vegetals i sòls. L'absorció dèrmica de contaminants també va estar assignada com exposició oral.

$$ER_{oral} = ADD_{oral} \cdot CSF_{oral} \cdot ED / AT$$

ER_{oral} - risc cancerigen oral
ADD_{oral} - dosi diària per exposició oral (kg-d)
ED - duració de l'exposició (anys)
AT - temps de vida (anys)
CSF_{oral} - factor de pendent de càncer $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$

$$ADD_{oral} = ADD_{soil} + ADD_{derm} + ADD_{veg}$$

ADD_{oral} - dosi diària per exposició oral $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$
ADD_{soil} - dosi diària per ingesta de sòls $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$
ADD_{derm} - dosi diària per absorció dèrmica $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$
ADD_{veg} - dosi diària per ingesta de vegetals $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$

8.2.- Risc no- cancerigen

Depenent del nivell d'exposició, l'efecte advers no- cancerigen es pot associar amb totes les substàncies a estudi. Per tant, la caracterització del risc no- cancerigen és sempre una anàlisi dosi-resposta, el qual compara si l'exposició humana actual excedeix un valor determinat d'exposició. El nivell d'exposició crític representa un valor de referència baix, del qual els efectes adversos es suposa que no són probables (Figura 8.1).

El valor de referència que s'ha fet servir per a l'exposició oral és la dosi de referència (RfD), i per l'exposició per inhalació és la concentració de referència (RfC). RfD i RfC són estimacions baixes del NOAEL (No-Observed-Adverse-Effect-Level) d'un contaminant, expressada per les diferents possibles vies d'exposició.

El risc no- cancerigen és expressat pel coeficient de perill (HQ) el qual relaciona l'exposició amb RfD i RfC, depenent de la via d'exposició. HQ es refereix solament al potencial al que alguns individus podria afectar, i no es dirigeix cap a un nivell absolut de risc. Si HQ és més gran que 1, això indica que hi ha un risc potencial cap a la salut. En conseqüència, l'estimació quantitativa del no- cancerigen solament

identifica els nivells d'exposició per sobre del quals es poden trobar efectes adversos no probables, però no diu res sobre l'increment del risc per a exposicions molt altes. Mentre que el risc cancerigen s'expressa com un increment de probabilitat de l'existència d'efectes cancerigens degut a una exposició addicional, el risc no-cancerigen s'avalua per a l'exposició total al contaminant.

Taula 8.2.- Dosis de referència i concentració de referència no- cancerigena.

	Dosis de referència oral (RfD) mg/kg/d	Concentració referència inhalació (RfC) µg/m^3
I-TEQ	1-4 pg/kg d	-
As	3.0E-4 *	-
Cd	1.0E-3 *	2.0E-2 *
Cr	3.0E-3 *	8.0E-3 **
Hg	3.0E-4 *	3.0E-1 *
Ni	2.0E-2 *	8.0E-2 *
Pb	6.0E-1 **	-

* USEPA, 2001; ** IRIS, 2002

8.2.1.- Risc no- cancerigen per inhalació

Per tal de determinar el risc no- cancerigen es va comparar la concentració de cada contaminant en l'atmosfera amb el RfC.

$$HQ_{inh} = (C_{air} + C_{res}) / RfC$$

HQ_{inh} - coeficient de perill per inhalació
C_{air} - concentració del contaminant en aire (µg/m³)
C_{res} - concentració del contaminant en partícules resuspeses (µg/m³)
RfC - concentració de referència (µg/m³)

8.2.2.- Risc no- cancerigen oral

Per tal de calcular el risc no- cancerigen mitjançant la via oral i dèrmica, es va comparar l'exposició a aquest contaminant amb la RfD.

$$HQ_{oral} = ADD_{oral} / RfD$$

HQ_{oral} - coeficient de perill oral
ADD_{oral} - dosi diària mitjana oral (mg/kg-d)
RfD - dosi de referència (mg/kg-d)

$$ADD_{oral} = ADD_{soil} + ADD_{veg} + ADD_{derm}$$

ADD_{oral} - dosi diària mitjana via oral $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$
ADD_{soil} - dosi diària per ingesta de sòls $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$
ADD_{veg} - dosi diària per ingesta de vegetals $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$
ADD_{derm}- dosi diària per absorció dèrmica $(mg/kg\text{-}d)^{-1}$

8.3.- Monte Carlo

El risc es pot determinar per a individus o grups de poblacó. El risc individual és el d'una persona en un escenari d'exposició definit; és a dir, una exposició a una certa concentració durant un període de temps determinat. Ja que els individus d'una determinada població poden ser descrits per un número de diferents escenaris d'exposició, poden haver-hi diferents nivells de risc dintre d'una població. Per tant, molts paràmetres utilitzats en la caracterització del risc són valors no constants; és a dir, presenten una variació.

A més a més de la variabilitat dels nivells d'exposició en la població, la distribució del risc sobre la salut depèn principalment de la susceptibilitat dels diferents individus. Els nivells d'exposició poden causar efectes sobre la salut que no afecten necessàriament a altres, a causa de que les susceptibilitats de cada persona varien en funció de l'edat, de l'estat físic i d'altres factors. Per tant, el valor de referència per la salut ha de ser representat per distribucions millor que per valors individuals.

Per altra banda, l'anàlisi de risc té una gran incertesa, ja que els valors reals empleats molt sovint són incerts. La reducció de la incertesa en les variables introduïdes és a vegades possible, i teòricament això dirigeix cap a una estimació probabilista més refinada.

Existeixen diferents mètodes amb l'objectiu de capturar la variabilitat e incertesa de l'anàlisi de risc. Durant els últims anys, el que ha guanyat més importància és la realització d'una anàlisi probabilística. La caracterització d'un risc probabilistic no calcula valors individuals, sinó que dóna una distribució del risc individual per a la població en la regió considerada, incloent-hi nombrosos escenaris.

En el present estudi, ha estat estimat el risc probabilistic mitjançant una simulació de Monte Carlo. Això ens permet la possibilitat de descriure la incertesa i variabilitat associada amb els paràmetres utilitzats en els càlculs del risc

Per a la realització de l'anàlisi probabilistic mitjançant la simulació de Monte Carlo s'ha utilitzat el software comercial Cristall Ball (versió 4.0). Cristall Ball considera la incertesa i variabilitat dels paràmetres a través del càlcul de risc. D'aquesta forma s'obté una funció de distribució del risc calculat. La simulació de Monte Carlo calcula

el risc varies vegades, amb valors del paràmetre pres a l'atzar, de la funció de distribució determinada. En aquest estudi s'ha realitzat una simulació amb 10.000 iteracions.

9.- Monitorització de les emissions de la planta Incineradora de Montcada i Reixac

9.1.- Presa de mostra i pre-tractament

Al llarg del treball es van recollir un numero total de 192 mostres (96 sòls i 96 vegetals). La determinació dels punts de mostratge va venir determinada per un estudi previ a la monitorització de la zona, on es va tenir en compte els resultats obtinguts en el model de dispersió així com la proximitat als nuclis de població veïns. D'aquesta manera van quedar determinats els punts de potencial major impacte ambiental de les emissions.

Es van recollir mostres a les següents distàncies de la planta 100, 250, 500, 750, 1000, 1500, 2000 i 3000 m de la planta incineradora en les direccions del vent: nord-est (NE), nord-oest (NO) i sud (S) (Figura 9.1). D'acord amb el model de dispersió, aquestes mostres es troben dintre de l'àrea d'influència directa de la incineradora.

Els períodes de recollida van ser l'octubre del 1996, 1997, 1998 i 2000. Les mostres es van recollir en punts diferents (dintre d'un radi de 5 metres), encara que pròxims entre ells, per tal de reduir el potencial impacte de possibles contaminacions puntuals per la presència de residus, brosses, etc., alienes a les emissions de la planta incineradora.

Les mostres del sòls es van recollir de la capa superficial de la terra a una profunditat sempre inferior als 3 cm. Un cop al laboratori, es varen assecar a 30ºC fins arribar a pes constant, i posteriorment es passaren per un sedàs de 2 mm de llum per homogeneïtzar la distribució de la grandària de les partícules. Les mostres es guardaren en bosses de polietilè fins el moment de les anàlisis.

Com a representant de la vegetació de la zona es va escollir l'herba comuna, del gènere de les *graminees,* la qual va presentar l'avantatge d'estar uniformement distribuïda a l'àrea d'estudi i ser fàcil de recollir i manejar. Les herbes, es recolliren als mateixos punts que els sòls, igualment per duplicat. Es recolliren uns 500 g de planta fresca en cada punt, tallant les tiges a uns 4 cm del sòl. En el moment de la recollida, les plantes tenien uns 25 cm d'alçada.

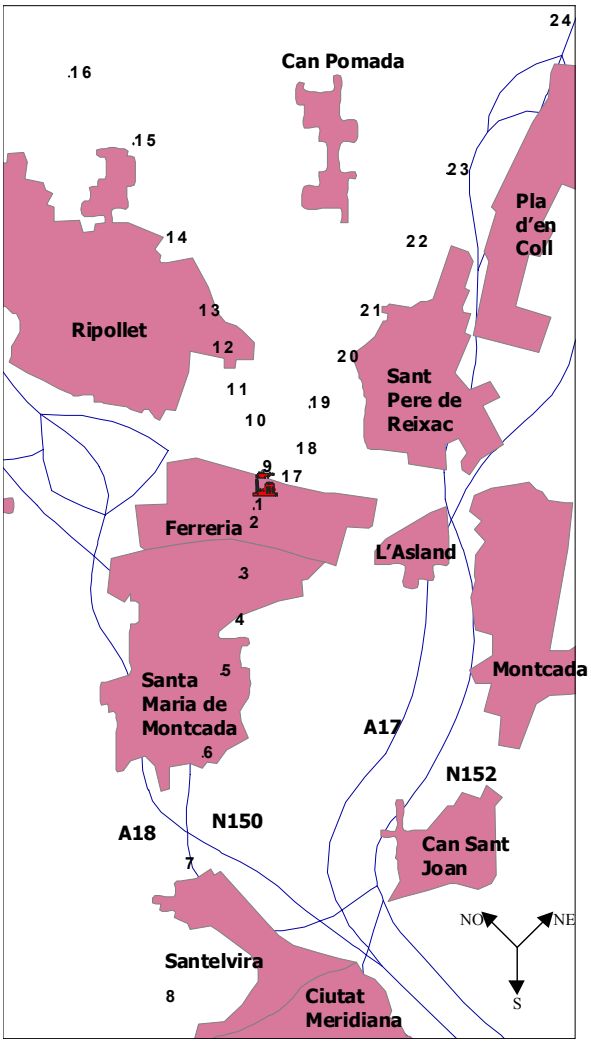

Figura 9.1.- Localització geogràfica dels punts de mostratge.

Immediatament després de la recollida, les plantes eren embolicades en paper d'alumini per ser traslladades al laboratori. Un cop allí foren triades a mà, eliminant els elements aliens o malmesos i les tiges més gruixudes, foren assecades a temperatura ambient, tornades a embolicar amb paper d'alumini i guardades en bosses de polietilè fins el moment de l'anàlisi.

9.2.- Determinacions analítiques del nivell de metalls pesants

9.2.1.- Sòls

Es pesaren uns 0.5 g de mostra seca i es tractaren amb 5 ml de HNO_3 (65% Suprapur, E. Merck, Darmstadt, GER) a l'interior de bombes de teflón. Es procedia a una predigestió de la mostra, deixant les bombes tancades hermèticament a temperatura ambient durant 8h. Després, les bombes foren escalfades a l'estufa a una temperatura de 80ºC durant 8h més per a la seva digestió. Un cop digerides es

deixaren refredar, es filtraren i enrasaren fins 25 ml amb aigua desionitzada (Schuhmacher *et al.,* 1996, 1997a).

Els nivells de Be, Cd, Cr, Mn, Ni, Pb, Sn, Tl i V es determinaren per inducció de plasma acoblat amb detector de masses (ICP-MS, Perkin Elmer Elan 6000). L'As i el Hg es determinaren per generació d'hidrurs. S'utilitzà Rh com estàndard intern.

L'anàlisi es controlà per la duplicació de les mesures i per la utilització de la solució de referència NIST 1643c, que es processà cada 10 mostres. Per cada element, la quantificació es basà en l'isòtop més abundant que no presentava interferències.

9.2.2.- Herbes

Es pesaren uns 0.5 g de mostra i es tractaren amb 4 ml de HNO_3 (65% Suprapur, E. Merck, Darmstadt, GER) a l'interior de bombes de teflón. Es procedia a una predigestió de la mostra deixant les bombes tancades hermèticament a temperatura ambient durant 8h. Després, les bombes foren escalfades a l'estufa a una temperatura de 80ºC durant 8h més, per a la seva digestió. Un cop digerides es deixaren refredar es filtraren i enrasaren fins 25 ml amb aigua desionitzada. (Schuhmacher *et al.,* 1996, 1998a).

Les concentracions de Cd, Mn, Hg, Pb, Sn i V es determinaren per inducció de plasma acoblat amb detector de masses (ICP-MS, Perkin Elmer Elan 6000). L'As es determinà per generació d'hidrurs. S'utilitzà Rh com estàndard intern. Cr, Ni i V s'analitzaren per espectrofotometria d'absorció atòmica amb cambra de grafit (Varian Spectrophotometer Spectra A-30).

L'anàlisi es controlà per la duplicació de les mesures i per la utilització de la solució de referència NIST 1643c que es processà cada 10 mostres. Per cada element, la quantificació es basà en l'isòtop més abundant que no presentava interferències.

9.3.- Determinació analítica dels nivells de dioxines i dibenzofurans

9.3.1.- Extracció de les mostres i "clean-up": Sòls

Les mostres van ser transferides a un soxlet on es va afegir 1 ng de cadascun dels 10 diferent estàndards de les PCDD/PCDFs marcats amb $^{13}C_{12}$, corresponents a cadascun dels homòlegs tetra- a octoclorats (Wellington Laboratories, Guelph, Canadà).

Després de l'extracció amb toluè, els extractes van ser evaporats fins a 2 ml. Seguidament, es passava a la neteja mitjançant diverses columnes obertes amb els següents absorbents: silicagel, silicagel impregnat amb àcid sulfúric, silicagel impregnat amb hidròxid sòdic, silicagel impregnat amb nitrat de plata, silicagel

impregnat amb carbó/Celite. L'extracte final fou concentrat amb corrent de nitrogen sec fins un volum d'uns 12 μl de solució de n-tetradecà. Abans de l'anàlisi per HRGC/HRMS, s'afegiren 8 μl de dissolució d'estàndard intern.

9.3.2.- Extracció de les mostres i "clean-up": Herbes

L'herba seca es tallà en bocins de menys de 5 mm utilitzant un tallador elèctric. Aproximadament 100 g d'herba seca i tallada s'utilitzaren per cada anàlisi.

El material es tractà inicialment per immersió en una solució aquosa 1M d'àcid clorhídric per alliberar les dioxines incloses en partícules de cendra dipositades a les herbes. A aquesta suspensió s'afegí "l'spik" marcat radioactivament. La suspensió es deixà reposar 2 h amb agitació ocasional, i es filtrà amb paper d'éster de cel·lulosa de 0.45 μl.

Els filtres, el seu contingut i l'eluat, s'assecaren a 60ºC durant 24 h abans de l'extracció amb Soxlet, utilitzant toluè durant 24 h més. Cada 5 mostres es processà un blanc començant pel pas de l'àcid clorhídric.

Els extractes foren tractats primerament amb silicagel impregnat d'àcid sulfúric. La barreja d'extracte i silicagel modificat es deixà reposar 15 min, i seguidament es retirà el silicagel modificat per filtració amb fibra de vidre.

Després de canviar de solvent a l'hexà, els extractes es processaren cromatogràficament a través de diverses columnes obertes. Consecutivament, s'utilitzaren els següents absorbents: silicagel, silicagel impregnat amb àcid sulfúric, silicagel impregnat amb hidròxid sòdic, silicagel impregnat amb nitrat de plata, òxid d'alumini, silicagel impregnat amb carbó/Celite, i de nou òxid d'alumini. L'extracte final fou concentrat amb corrent de nitrogen sec fins un volum d'uns 12 μl de solució de n-tetradecà. Abans de l'anàlisi per HRGC/HRMS, s'afegiren 8 μl de dissolució d'estàndard intern.

9.3.3.- Instrumentació

Per la determinació dels grups de congèneres de PCDD/F amb el mateix grau de cloració, i pels hepta- i octa- congèneres substituïts a les posicions 2,3,7,8, s'utilitzà una columna de sílice fos: 60 m DB-5ms; polisiloxà 5% fenil, 95% metil, 0.25 mm i.d. i 0.1 μl de J&W Scientific. S'utilitzà un cromatògraf de gas Hewlett Packard 5890, sèrie II, en combinació amb un espectròmetre de masses de baixa resolució Hewlett Packard 5972.

Per la determinació dels tetra- a hexa- congèneres substituïts a les posicions 2,3,7,8, s'utilitzà una columna de sílice fos: 60 m SP2331, biscianopropilfenil

polisiloxà, 0.25 mm i.d. i 0.2 μl de Supelco. S'utilitzà un cromatògraf de gas Varian 3300 equipat amb un injector de septum programable, en combinació amb un espectròmetre de masses d'alta resolució Finnigan MAT 95.

Les determinacions quantitatives de les PCDD/PCDFs es van realitzar mitjançant el mètode de la dilució isotòpica, utilitzant els factors de resposta relativa obtinguts prèviament a partir de cinc calibracions de la solució estàndard (Chemsyn Science Laboratories). Per cada grup de 6 mostres es va analitzar un blanc.

La recuperació dels estàndards interns va variar entre el 80 i el 110 %. La desviació relativa estàndard del mètode va ser del 15%. El límit de detecció va estar comprés entre 0.013 pg/g i 0.188 pg/g pels diferents isòmers (tetra- a octaclordibenzodioxines i dibenzofurans).

10.- Tractament estadístic

Amb totes les dades procedents de l'analítica dels nivells de metalls pesants i dioxines en les mostres de sòls i herbes, s'ha portat a terme un estudi estadístic exhaustiu, per tal d'identificar diferències significatives durant els diferents anys de recollida, o per identificar la influència de la planta sobre els nivells de les mostres preses a diferents distàncies de la font emissora. Per aquest motiu, s'ha aplicat a l'estudi una estadística descriptiva, tests paramètrics, no paramètrics i anàlisis multivariants. Tots els tests estadístics que s'han portat a terme s'han realitzat mitjançant el programa informàtic SPSS (Statistical Package for the Social Sciences) per a Windows, versió 10.0.

Tant els tests paramètrics com els no paramètrics, s'utilitzen per detectar la influència d'un factor sobre les dades d'estudi. Els test paramètrics, suposen que les dades que s'analitzen segueixen una distribució normal (Gaussiana) i una homogeneïtat. Els tests estadístics no-paramètrics presenten l'avantatge de no suposar una forma especifica de la distribució de les dades, solament suposen una continuïtat de la distribució de la variable i la independència de les observacions. Per tant, amb el terme de proves no-paramètriques s'engloben totes aquelles que les seves hipòtesis es formulen independentment de les distribucions de probabilitat que segueixen les variables. Per altra banda, els test no-paramètrics presenten la desavantatge de ser menys robusts que els paramètrics. Aquest fet és degut a que el mètode no-paramètric no té en compte el valor de les dades, sinó l'ordenació d'aquestes.

En els estudis ambientals, tant els paramètrics com els no-paramètrics es poden utilitzar per tal d'identificar diferencies temporals (durant un període de temps), espacials (efectes del canvi de lloc), o de diverses intervencions humanes.

10.1.- ANOVA

L'anàlisi de la variància "one-way" o ANOVA, és una eina estadística que permet comparar simultàniament varies mitjanes muestrals. Les mitjanes es comparen per tal d'establir si són totes iguals (hipòtesi nul·la), o si al menys una d'elles és diferent de la resta (hipòtesi alternativa). El nom d'ANOVA fa al·lusió a que la comparació de més de dues mitjanes es realitza mitjançant el càlcul i la comparació de dues variancies, però cal tenir present que l'objectiu és comparar mitjanes i no variances.

Malgrat totes les avantatges que presenta l'ANOVA, per a poder aplicar-lo s'han de complir al menys de forma aproximada les condicions següents:

a.- *Normalitat*, la distribució interna de cada sèrie ha de ser normal. Per comprovar això s'aplica el test de Kolmogorov-Smirnov.

b.- *Homogeneïtat*, la variància de les sèries han de ser iguals. Això s'ha de comprovar mitjançant els tests de Barlett o Levene.

Si aquestes condicions no és compleixen en un grau satisfactori els resultats de l'ANOVA serien incorrectes.

10.2.- Test de Kolmogorov-Smirnov

El test de Kolmogorov-Smirov serveix per saber si un conjunt de dades segueixen una distribució normal o no.

Per saber si s'acompleix la normalitat, s'estableix un contrast d'hipòtesis, de manera que la hipòtesi nul·la afirma que la població segueix una distribució normal i la hipòtesi alternativa nega l'afirmació anterior. Es comparen el valor del nivell de significació crític per aquesta població i el nivell amb el que generalment es treballa ($\alpha \leq 0.05$), de manera que, si el primer valor és major s'accepta la hipòtesi nul·la o la suposició de normalitat de la població. En cas contrari, s'haurà d'acceptar la hipòtesi alternativa.

El fet de que un conjunt de dades presenti una distribució de dades, moltes vegades és qüestió de la mida de la mostra. Segons el Teorema del Límit Central, una població de mitjanes tendeix a ser normal tant quant més gran és el número de dades amb el que és calcula la mitjana, independentment de quina sigui la distribució de les dades individuals.

10.3.- Test de Levene i Barlett

Els tests de Levene i Barlett serveixen per contrastar si diferents grups de dades tenen la mateixa variància o no.

Per saber si unes dades són homocedàstiques; és a dir, si tenen igualtat de variàncies, s'estableix un contrast d'hipòtesis. La hipòtesi nul·la afirma que les dades tenen la mateixa variància i la hipòtesi alternativa nega l'anterior afirmació. Es comparen el valor del nivell de significació crític per aquesta població, i el nivell amb el que generalment és treballa ($\alpha \leq 0.05$), de manera que si el primer valor és major s'accepta la hipòtesis nul·la. En cas contrari, s'haurà d'acceptar la hipòtesi alternativa.

El test de Barlett és molt sensible a la falta de normalitat de les sèries. Si alguna de les sèries s'allunya de la normalitat tendeix a rebutjar la hipòtesi nul·la (variància de les sèries iguals) un número excessiu de vegades. En tal cas es recomanable utilitzar el test de Levene, el qual no detecta incorrectament mostres heterogènies pel fet de que la seva distribució no sigui normal quan ens trobem amb mostres realment homogènies. Malgrat això, si les mostres són normals cal utilitzar el test de Barlett que és molt més sensible front a la falta d'homogeneïtat.

Si les dades no són homogènies, es poden provar diverses transformacions que si bé no donen garantia de l'homogeneïtat, l'aconsegueixen en alguns casos. Les transformacions més freqüents són:

a.- Extraure l'arrel quadrada de les dades. Aquesta està considerada com una transformació suau.

b.- Obtenir el logaritme, o la inversa, que són transformacions més dures.

c.- Restar-li la mitjana de la població, i dividir el resultat per la desviació estàndard de la població.

10.4.- Tests no paramètrics

Ja que les mostres de l'estudi de monitorització no seguien una distribució normal, i tampoc van ser homogènies, la significància estadística de les nostres dades es va avaluar mitjançant tests no-paramètrics, per tal d'identificar diferències espacials i temporals en les mostres.

10.4.1.- Test de Kruskal-Wallis

Aquest mètode estadístic serveix per a comparar k grups independents i determinar si existeixen diferències entre les dades dels diferents nivells d'un factor. Consisteix

en assignar un rang a cada valor, considerant les mostres conjuntament. Amb aquests rangs es calcula l'índex estadístic H, tal i com s'expressa a l'equació següent.

$$H = \frac{12}{N^2 + N}\left(\sum \frac{R_i^2}{n_i}\right) - 3(N+1)$$

N - número total d'observacions
n_i - número total d'observacions en el grup i
Ri - suma dels rangs de les observacions del grup i

Si totes les mostres procedeixen de la mateixa població, l'índex H segueix la llei de la Chi quadrat, amb k-1 graus de llibertat (una distribució de Chi quadrats és una distribució continua i asimètrica, que quan augmenten els graus de llibertat convergeix cap a una distribució normal com la distribució d'student, però més lentament). Si hi ha diferència entre els grups, es realitzen comparacions duals (el test de la U de Mann-Whitney).

10.4.2.- Test de la U de Mann-Whitney

Es tracta d'una altra prova de distribució lliure. És l'equivalent no-paramètric del test de la t amb dades independents.

Aquest test és d'aplicació quan es disposa de dues mostres aleatòries independents de dos poblacions. Es combinen les dades formant una sola mostra, s'assignen rangs a les observacions, i s'estudia quantes vegades les dades d'una mostra es troben precedides per les dades de l'altra mostra. D'aquesta manera s'assigna un número d'ordre a cada valor, considerant ambdues mostres conjuntament. Es sumen per separat els rangs de cada mostra i es calculen els índexs U.

$$U_1 = n_1 n_2 + \frac{n_1(n_1+1)}{2} - R_1$$

$$U_2 = n_1 n_2 + \frac{n_2(n_2+1)}{2} - R_2$$

n_1 - número d'elements del grup 1
n_2 - número d'elements del grup 2
R_1 - suma de rangs en el grup 1
R_2 - suma de rangs en el grup 2

La significació estadística es comprova amb l'índex U menor. Per a que existeixi una diferència significativa entre ambdues distribucions, deuen ser més petits els valors d'U calculats que el corresponent valor tabulat.

10.6.- Mètodes multivariants

Els anàlisis químics medi ambientals generen una gran quantitat de dades, i la tendència es anar cap a més i més sofisticats anàlisis d'un relatiu número petit de mostres. L'aproximació tradicional ha estat utilitzar un número petit de mostres d'una sèrie llarga de mostres. Malgrat això, avui en dia una anàlisi de PCDD/Fs per cromatografia de gasos i espectrometria de masses genera cents de senyals per a congèneres individuals i per congèneres co-eluits. D'aquesta manera la taula de dades que s'obté, incloent-hi solament un número de mostres petit, és dur de revisar. Per aquest motiu, existeix una gran necessitat de mètodes estadístics els quals permetín agilitar la manipulació de la gran matriu de dades.

Els mètodes de projecció multivariant, com l'anàlisi de components principals, l'anàlisi de "clusters", l'anàlisi discriminant, etc., combinen una gran quantitat de variables en unes petites dimensions descriptives. Aquestes variables resumeixen sistemàticament la informació i donen una visió de l'esquema dominant o de la principal tendència de les dades.

10.6.1.- Anàlisi de Components Principals (ACP)

L'anàlisi de components principals va ser desenvolupat cap als anys trenta, encara que la seva aplicabilitat pràctica solament va poder començar quan es va tenir accés a medis informàtics de càlcul relativament potent, concretament des de que es va resoldre tècnicament el problema de diagonalitzar matrius de gran mida.

L'anàlisi de component principals és un mètode analític multivariant de les dades, dissenyat per tal d'extreure la variació sistemàtica d'una base de dades. L'objectiu de l'ACP és reconvertir les variables inicials en uns pocs components que són una combinació lineal de les variables inicials (Components Principals). A partir d'una matriu de dades d'individus per variables (k x n) quantitatives, es tracta de condensar la informació de les n variables en m ($m < n$) noves variables sintètiques anomenades components o factors, les quals tenen la característica de ser ortogonals entre si. Cadascun d'aquests components m són una funció lineal de les n variables originals. Per tant, es pot entendre com un mètode de reducció de la dimensió del problema, ja que redueix la dimensió de n a m.

Matemàticament, l'ACP descomposa una matriu de dades X amb n columnes (ex., compostos) i k files (ex., mostres) en termes d'una matriu més petita designada T i P', la qual emmagatzema diferents parts de la informació de X. Això correspon a una descomposició de la matriu de dades en mitjanes (x_k), punts (t_{ia}), càrregues (p'_{ak}) i residuals (e_{ik}) segons l'equació:

$$X_{ik} = \overline{X}_k + \sum_{a=1}^{A} t_{ia} p'_{ak} + e_{ik}$$

X_{ik} són les mostres transformades en la caracterització multivariant. L'índex *i* és utilitzat per als compostos i l'índex *k* per a les mostres. El punt t_{ia} descriu la localització d'un objecte (compost) *i* en els a-th components principals (CP). El valor absolut d'una càrrega indica en quina quantitat la variable k (compost) contribueix en particular en l'ACP. El signe de la carrega demostra si la variable és positiva o negativament correlacionada amb el CP. El primer CP calculat és la variable sintètica que resumeix millor la informació que contenen les dades mentre que, el segon explica la següent variància més gran i així continua decreixent. Cada CP explica una quantitat de la variància total, però sempre explica una mica menys que el CP anterior.

Podem així dir que l'ACP reconverteix les variables inicials en uns pocs components que són una combinació lineal de les variables originals (Components Principals), les quals donen una descripció molt amplia, amb una pèrdua molt petita d'informació. A cada mostra se li dóna una puntuació per a cadascun dels components, amb la finalitat de poder ser analitzada.

11.- "Case study": Planta Incineradora de Residus Sòlids Urbans de Montcada i Reixac

La planta Incineradora de Residus Sòlid Urbans de Montcada i Reixac va entrar en funcionament al 1975. Es troba ubicada al Polígon Industrial de La Ferreria i presta servei a uns 200.000 habitants. Al 2000 va incinerar al voltant de 46.000 tones, amb una producció d'energia de quasi bé 3.000 MWh. La IRSU es troba situada en un àrea molt activa industrialment i amb una alta densitat de tràfic. Les característiques de la planta es troben resumides a la Taula 11.1.

Fins al 1999, com a sistema de neteja de gasos la planta utilitzava un filtre electrostàtic. Al 1999, per tal d'adaptar la planta a la legislació europea sobre emissions, es va instal·lar un sistema de neteja de gasos, que va consistir en la instal·lació d'un àcid gas (HCl/SO2), un equip limitant d'emissions de metall, i un filtre d'absorció de carbó actiu és van afegir al sistema. Com a conseqüència d'aquestes millores tècniques les emissions de dioxines i metalls pesants es van veure reduïdes considerablement (Taula 11.2 i 11.3).

Taula 11.1.- Característiques de la font emissora.

Alçada (m)	48	
Elevació (m)	50	
Diàmetre (m)	1.77	
	abans millores tècniques	**després millores tècniques**
Temperatura (°C)	236.4	175.1
Velocitat volumètrica del flux (Nm³/h)	33,332	42,951
Velocitat de sortida (m/s)	8.0	8.9

Taula 11.2- Nivell d' emissions dels 17 congèneres tòxics PCDD/Fs (ng/m^3).

	abans millores tècniques	**després millores tècniques**
2,3,7,8-TCDD	1.29	0.007
1,2,3,7,8-PeCDD	15.41	0.026
1,2,3,4,7,8-HxCDD	21.10	0.032
1,2,3,6,7,8-HxCDD	48.88	0.085
1,2,3,7,8,9-HxCDD	55.28	0.074
1,2,3,4,6,7,8-HpCDD	227.66	0.533
OCDD	251.24	0.665
2,3,7,8-TCDF	94.10	0.029
1,2,3,7,8-PeCDF	10.81	0.010
2,3,4,7,8-PeCDF	81.04	0.028
1,2,3,4,7,8-HxCDF	121.76	0.052
1,2,3,6,7,8-HxCDF	69.21	0.050
1,2,3,7,8,9-HxCDF	10.47	0.003
2,3,4,6,7,8-HxCDF	135.83	0.102
1,2,3,4,6,7,8-HpCDF	227.06	0.231
1,2,3,4,7,8,9-HpCDF	68.01	0.040
OCDF	198.91	0.345
I-TEQ	111.39	0.086

Taula 11.3.- Nivell d'emissions dels metalls pesants (μg/m^3).

	abans millores tècniques	**després millores tècniques**
As	472.35	30.87
Cd	64.3	2.37
Cr	28.8	5.35
Hg	230	8.84
Ni	33.55	12.14
Pb	1918.5	332.23

Condicions meteorològiques de l'àrea de Montcada i Reixac

El Servei de Meteorologia de Catalunya ens va proporcionar informació meteorològica semi-horària per als anys 1996 - 2000, provenint de l'estació meteorològica situada a la localitat de Montcada i Reixac. Les dades meteorològiques facilitades pel Servei de Meteorologia de Catalunya van comprendre valors de la velocitat i direcció del vent, temperatura ambient, precipitació, i radiació solar. La resta de la informació necessària per a poder realitzar la simulació va ser calculada utilitzant aquestes dades. Aquesta estació esta situada a 3.6 Km de la font emissora en direcció oest. Malgrat això, donada la mancança de dades més properes a la nostra font vam considerar que les dades procedents d'aquesta estació serien assimilables a les condicions meteorològiques de la nostra planta.

Les dades meteorològiques presenten un 27% i un 40% del temps amb calmes al 1996 i 2000 respectivament, durant aquest temps les velocitats del vent horàries no van excedir la velocitat de 0.1 m/s. La velocitat mitjana del vent per a 1996 va ser de 2.75 m/s i a 2000 va ser de 3.08 m/s. A les Figures 11.1 i 11.2 es pot observar la rosa del vent corresponent als anys 1996 i 2000.

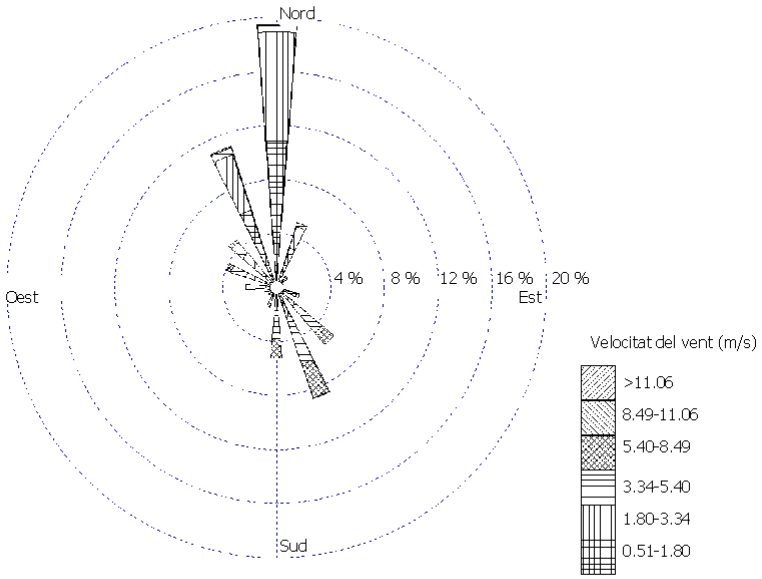

Figura 11.1.- Rosa de vent per al 1996 (vent bufant des de).

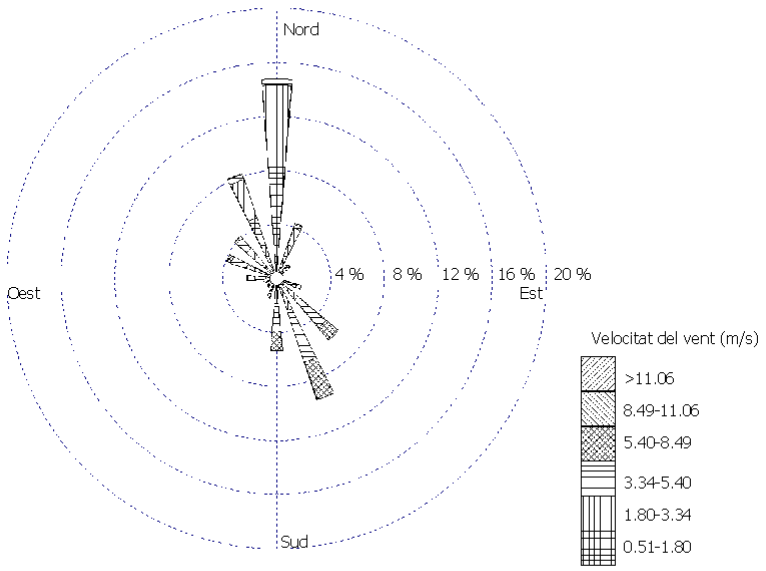

Figura 11.2.- Rosa de vent per al 2000 (vent bufant des de).

Cartografia de l'àrea

A la Figura 11.3 es troba representada la cartografia de l'àrea d'estudi així com els receptors discrets considerats, la font emissora i l'estació meteorològica considerada. La malla representada correspon a les dades cartogràfiques d'una malla de 10x10 km amb un espaiat de 200, on el punt central és la font emissora

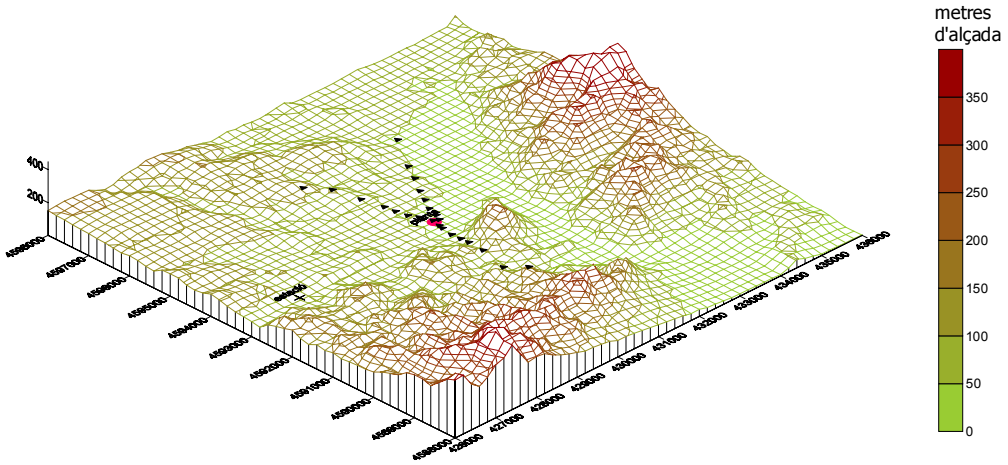

Figura 11.3.- Representació dels receptors discrets en la cartografia de l'àrea.