

Índice

1.	Cálculo de Niveles de Remediación Específicos	264
2.	Nivel de remediación por la exposición a través de la ingestión de suelos	265
2.1	Ingestión de suelos	265
2.2	Ingestión de agua	266
3.	Nivel de remediación por la exposición dérmica a suelos	266
4.	Nivel de remediación por la exposición a través de la inhalación	267
4.1	Inhalación de suelos	267
4.2	Inhalación de partículas y gases	269
5.	Nivel de remediación por exposición a suelos contaminados, tomando en consideración la ingestión de suelos y la exposición dérmica	269
6.	Nivel de remediación por la exposición a suelos contaminados, tomando en consideración la ingestión de suelos, la exposición dérmica y la inhalación	270
7.	Ejemplo del cálculo de los niveles de remediación de un sitio contaminado en México.	271

ANEXO K Método de cálculo para determinar los niveles de remediación

1. Cálculo de Niveles de Remediación Específicos

La determinación de los niveles de remediación de contaminantes de suelos por sustancias no cancerígenas pero que puedan tener efectos adversos sobre la salud, se basa en un modelo lineal. El Nivel o Concentración de Remediación Específica total de un sitio (NRE) se calcula sumando los niveles de remediación correspondientes a cada tipo específico de exposición (NRE_i).

$$NRE_{Total} = NRE_{ING(suelos)} + NRE_{ING(agua)} + NRE_{INH(gases)} + NRE_{INH(polvos)} + NRE_{DER}$$

$$NRE_{Total} = \sum_{i=1}^n NRE_i$$

Los niveles de remediación específicos por tipo de exposición se calculan despejando de la ecuación del “Coeficiente o Índice de Peligro o de Peligrosidad” (IP) de tal manera que se obtenga la Dosis de Exposición (DE) en dependencia del IP y la Dosis de Referencia (DdR).

$$IP_i = \frac{DE_i}{DdR_i}$$

$$DE_i = IP_i * DdR_i$$

IP: Índice o coeficiente de peligrosidad
 DE: Dosis de exposición [mg /Kg peso corporal]
 DdR: Dosis de referencia [mg/kg*d]

2. Nivel de Remediación por exposición a través de la ingestión.

2.1 Ingestión de suelos.

La dosis de exposición por ingestión de suelos se calcula con la siguiente ecuación:

$$DE_{ING} = \frac{C_s * TI_{ING} * FBD_{ING} * FCE * FrE * DuE}{PC * PTE_M}$$

$$FCE = \frac{FrE * DuE}{PTE_M}$$

$$DE_{ING} = \frac{C_s * TI_{ING} * FBD_{ING} * FVC * FCE}{PC}$$

Donde:

C_s	Concentración de contaminante en suelos [mg/Kg]
TI_{ING}	Tasa de ingestión [mg/d]
FBD_{ING}	Factor de biodisponibilidad o tasa de absorción gastrointestinal [%]
FVC	Factor volumétrico de conversión = 1×10^{-6}
PC	Peso corporal [Kg]
FCE	Factor de corrección de la exposición [-]
FrE	Frecuencia de exposición [d/año]
DuE	Duración de la exposición [años]
PTE_M	Periodo de tiempo promedio de exposición [d]

El Factor de biodisponibilidad o tasa de absorción gastrointestinal (FBD) se calcula por medio del método de Ruby *et al.* (1996) el cual incluye las técnicas de mezclado y de la celda de prueba desarrolladas por John Drexler del Departamento de Ciencias Geológicas de la Universidad de Colorado en Boulder. "In Vitro Bioaccessibility Test: Standard Operating Procedures for Sequential Stomach and Small Intestinal Phase Extraction" (NFESC, User's Guide, UG-2041-ENV, 2000). Este método es específico para metales pesados.

El nivel de remediación específico del sitio cuando la única ruta de exposición es la ingestión de suelos para un índice de peligro ($IP \leq 1$) y una dosis de referencia (DdR) dada, se obtiene con la siguiente fórmula:

$$NRE_{ING} = \frac{DdR_{ING} * (IP \leq 1) * PC}{FBD_{ING} * TI_{ING} * FCE * FVC}$$

2.2 Ingestión de agua.

Para el cálculo de la ingestión de agua se debe de aplicar la tasa de ingestión de agua (TI_{ING-A}) y la correspondiente dosis de referencia:

$$NRE_{ING,A} = \frac{DdR_{ING,A} * (IP \leq 1) * PC}{FBD_{ING,A} * TI_{ING,A} * FCE * FVC}$$

3. Nivel de Remediación por exposición dérmica a suelos

La exposición por exposición dérmica se calcula con la siguiente ecuación:

$$DE_{DER} = \frac{C_S * TSA * FCV * FBD_{DER} * FCE}{PC}$$

$$TSA = SP * PPE * FAP$$

C_S	Concentración de contaminante en suelos [mg/Kg]
SP	Superficie de la piel del grupo poblacional [cm ² /evento]
SPD_{DER}	Superficie de la piel disponible para contacto o área expuesta [cm ² /evento] =SP*PPE
PPE	Porcentaje de área de la piel expuesta [%]
FAP	Factor de adherencia a la piel [mg/cm ²]
TSA	Total de suelo adherido [mg]
FVC	Factor volumétrico de conversión =1 x10-6
FBD_{DER}	Factor de biodisponibilidad o Tasa de absorción en piel del contaminante [%]
PC	Peso corporal [Kg]
FCE	Factor de corrección de la exposición [-]
FeE	Frecuencia de exposición [d/año]
DuE	Duración de la exposición [años]

El nivel de remediación específico cuando la única ruta de exposición a suelos es la dérmica, cuando el IP es ≤ 1 y para una dosis de referencia (DdR) dada, se obtiene con la siguiente fórmula:

$$NRE_{DER} = \frac{DdR * (IP \leq 1) * PC}{FBD_{DER} * FVC * TSA * FCE}$$

4. Nivel de Remediación por la exposición a través de la inhalación.

La dosis de exposición por inhalación se calcula con la siguiente ecuación:

$$DE_{INH} = \frac{C_A * TI_{INH} * FBD_{INH} * FCE}{PC}$$

C_A	Concentración de contaminante en aire [mg/L]
TI_{INH}	Tasa de Inhalación [m ³ /día]
PC	Peso corporal [Kg]
FCE	Factor de corrección de la exposición [-]
FVC	Factor volumétrico de conversión = 1×10^{-6}
FBD_{INH}	Factor de biodisponibilidad o tasa de absorción del contaminante [%]

Los valores de las tasas de inhalación se obtuvieron de la Agencia para el Registro de Enfermedades y de Sustancias Tóxicas de los EU (ASTDR por sus siglas en inglés).

4.1. Inhalación de suelos

El nivel de remediación específico que se obtiene por la exposición por inhalación a suelos para un $IP \leq 1$ y una dosis de referencia dada, se obtiene con la siguiente ecuación:

$$NRE_{INH} = \frac{DdR * (IP \leq 1) * PC}{FBD_{INH} * TI_{INH} * FCE}$$

Para el cálculo de la exposición por inhalación requiere de la medición de la concentración de contaminantes en los gases del suelo y de habitaciones y espacios cerrados.

Si estas mediciones no son disponibles, se pueden estimar al transformar la concentración de un contaminante en suelos (C_S) a la concentración teórica correspondiente al equilibrio químico de un contaminante en el aire (C_A). Este estimado puede variar con respecto a la concentración real del contaminante en el aire.

$$C_s = K_{SG} * C_A = \frac{X_s}{m_s} \quad [\text{mg/Kg}]$$

$$K_{SG} = \frac{K_d}{H}$$

$$H = \frac{C_A}{C_w} = \frac{P_0}{S \cdot R \cdot T}$$

$$K_d = \frac{C_s}{C_w} = f_{OC} * K_{OC}$$

$$C_A = \frac{C_S}{K_{SG}} = \frac{C_S * H}{K_d} = \frac{H}{f_{OC} * K_{OC}} * C_S$$

Por lo tanto, en este caso la dosis de exposición por inhalación se calcula de la siguiente manera:

$$ED_{INH} = \frac{\frac{C_S * H}{K_d} * TI_{INH} * FBD_{INH} * FCE}{PC}$$

considerando $FV = \frac{K_d}{H}$

$$\left[\frac{1}{FV} \right] = \frac{H}{K_d} = [FV]^{-1}$$

R	Constante general de gases [J/(mol.K)]
T	Temperatura [K]
P ₀	Presión de vapor el punto de saturación [Pa]
S	Solubilidad en agua [mol/l]
C _A	Concentración de la sustancia contaminante en la fase gaseosa (aire) [mg/l]
C _S	Concentración de la sustancia contaminante en el suelo [mg/Kg]
C _W	Concentración de la sustancia contaminante disuelta en agua [mg/l]
H	Constante de la ley de Henry [-]
K _{OC}	Coefficiente de partición de carbón orgánico en suelos [cm ³ /g] o [L/Kg]
f _{OC}	Contenido de carbón orgánico en suelo [%]
FV	Factor de volatilización [-]
K _d	Coefficiente de distribución sólidos de agua [L/m ³]
K _{SG}	=K _d /H, Coeficiente de distribución de una sustancia entre el suelo y el aire del suelo
X _s	Contenido de una sustancia en suelo [mg]
m _d	Masa de suelo [Kg]

Para determinar el factor de volatilización (FV) existen otros métodos más exactos que el expuesto anteriormente, el cual solo ejemplifica el caso del equilibrio químico de un contaminante en las fases agua y aire.

Para determinar el factor de volatilización (FV) también pueden aplicarse las siguientes ecuaciones.

$$FV = \left(\frac{1}{C} \right) * \left[\frac{\sqrt{3.1 * D_A * T}}{2 * \rho_B * D_A} \right] * \left(10^{-4} \frac{m^2}{cm^2} \right)$$

$$D_A = \frac{(n_A^{0.3} * D_i * H) + (n_w^{0.3} * D_w)}{n^2 * (\rho_B * K_D + n_w + n_A * H)}$$

FV	Factor de Volatilización	m ³ /Kg
1/C	Inverso de la concentración promedio	
DA	Difusividad aparente	cm ² /seg
T	Intervalo de exposición	Seg
ρB	Densidad de bulto (aparente) del suelo seco	g/cm ³
ρS	Densidad del suelo por partícula	g/cm ³
n	Porosidad total del suelo n = 1-(ρB/ρS)	Vporos/Vsuelo
nA	Porosidad del suelo rellena de aire nA = n-nW	Vaire/Vsuelo
nW	Porosidad del suelo rellena de agua	Vagua/Vsuelo
Di	Difusividad en aire	cm ² /seg
DW	Difusividad en agua	cm ² /seg
H	Constante de Henry	--
KD	Coefficiente de partición suelo - agua	cm ³ /g
K _{oc}	Coefficiente de partición de carbón orgánico en suelo - agua	cm ³ /g
f _{oc}	Fracción de carbón orgánico en suelo	g/g

4.2. Inhalación de partículas y gases.

La estimación de la dosis de exposición por inhalación que incluya la inhalación de partículas y gases se puede obtener con la siguiente ecuación:

$$DE_{INH} = \frac{C_s * TI_{INH} * FBD_{INH} * FCE * (FEP + FV)^{-1}}{PC}$$

Donde:

FEP Factor de Emisión de Partículas (Particle Emission Factor), que es el inverso de la concentración de partículas en el aire en el sitio de medición. Este valor se determina midiendo la concentración de partículas PM10 según un método reconocido.

El nivel de remediación en este caso se calcula:

$$NRE_{NH} = \frac{(IP \leq 1) * DdR * PC * (PEF + FV)}{TI_{INH} * FBD_{INH} * FCE}$$

El factor de volatilización (FV) se calcula para aquellos contaminantes o sustancias que tengan un peso molecular (PM) menor a 200 g/mol y una constante de Henry (H) mayor a 10⁻⁵.

5. Nivel de Remediación por la exposición a suelos contaminados, tomando en consideración la ingestión de suelos y la exposición dérmica.

El nivel de remediación para este caso se calcula con las siguientes ecuaciones:

$$NRE_{Total} = NRE_{ING} + NRE_{DER}$$

$$IP = \frac{DE_{ING} * FBD_{ING}}{DdR_{ING}} + \frac{DE_{DER} * FBD_{DER}}{DdR_{DER}}$$

$$NRE_{Total} = \frac{IP * PC}{FCV * FCE} * \left[\frac{DdR_{ING}}{FBD_{ING} * TI_{ING}} + \frac{DdR_{DER}}{FBD_{DER} * TI_{DER}} \right]$$

6. Nivel de Remediación por la exposición a suelos contaminados, tomando en consideración la ingestión de suelos, la exposición dérmica y la inhalación.

$$NRE_{Total} = NRE_{ING} + NRE_{DER} + NRE_{INH}$$

$$IP = \frac{DE_{ING}}{DdR_{ING}} + \frac{DE_{DER}}{DdR_{DER}} + \frac{DE_{INH}}{DdR_{INH}}$$

$$DE_{ING} = \frac{C_S * TI_{ING} * FBD_{ING} * FVC * FCE}{PC}$$

$$DE_{DER} = \frac{C_s * TSA * FCV * FBD_{DER} * FCE}{PC}$$

$$DE_{INH} = \frac{C_A * TI_{INH} * FBD_{INH} * FCE}{PC} \quad \text{ó}$$

$$DE_{INH} = \frac{C_S * TI_{INH} * FBD_{INH} * FCE * (FEP + FV)^{-1}}{PC}$$

$$IP = \frac{CS * TI_{ING} * FCV * FCE * FBD_{ING}}{PC * DdR_{ING}} + \frac{CS * A * FV * FCE * FBD_{DER}}{PC * DdR_{DER}} + \frac{CS * (FEP + FV)^{-1} * TI_{INH} * FCE * FBD_{INH}}{PC * DdR_{INH}}$$

Suponiendo que se requiere calcular el nivel de remediación para un solo grupo poblacional con un peso corporal (PC) idéntico para cada individuo y para un factor de exposición (FCE) idéntico, entonces el nivel de remediación total (NRE) se calcula sustituyendo CS por NRE para un índice de peligro ($IP \leq 1$) dado.

$$NRE_{Total} = \frac{IP * PC}{FCE} * \left[\frac{DdR_{ING}}{FCV * FBD_{ING} * TI_{ING}} + \frac{DdR_{DER}}{FCV * FBD_{DER} * A} + \frac{DdR_{INH} * (FEP + FV)}{FBD_{INH} * TI_{INH}} \right]$$

7. Ejemplo del cálculo de los niveles de remediación para un sitio contaminado de México.

Un ejemplo de la aplicación de dichas ecuaciones, son los cálculos de los niveles de remediación específicos presentados en el estudio de riesgo de los ex-talleres de FNM en Aguascalientes. Los cálculos incluyeron únicamente la exposición por ingestión y por exposición dérmica (Llamas *et al.*, 2004).

Nivel de Remediación para suelos (Diesel):

$$NER_{Diesel} = \frac{IP * PC * PTE_M}{FeE * DuE * \left[\left(\frac{1}{DdR_{oral}} * \frac{TI_{ING} * FBD_{ING}}{10^6 \text{ mg/Kg}} \right) + \left(\frac{1}{DdR_{dermal}} * \frac{TSA * FAP * FBD_{DER}}{10^6 \text{ mg/Kg}} \right) \right]}$$

Transformando la ecuación se obtiene:

$$NER_{Diesel} = \frac{IP * PC}{FeE} * \left[\frac{DdR_{oral}}{TI_{ING} * FBD_{ING} * FCV} + \frac{DdR_{dermal}}{TSA * FAP * FBD_{DER} * FCV} \right]$$

Cálculo del nivel de remediación para la exposición por inhalación de volátiles:

$$NER_{Volatiles} = \frac{IP * PC * PTE_M}{FeE * DuE * \left[\left(\frac{1}{DdR_{INH}} * \frac{TI_{INH} * FBD_{INH}}{10^6 \text{ mg/Kg}} \right) + \left(\frac{1}{DdR_{INH} * GI} * \frac{TSA * FAP * FBD_{INH}}{10^6 \text{ mg/Kg}} \right) \right]}$$

Cálculo del nivel de remediación para aromáticos:

$$NRE_{Aromaticos} = \frac{R * PC * PTE_M}{FeE * DE * \left[\left(\frac{TI_{ING} * FBD_{ING} * CSF_{oral}}{10^6 \text{ mg/Kg}} \right) + \left(\frac{TSA * FAP * FBD_{DER} * CSF_{oral} * GI}{10^6 \text{ mg/Kg}} \right) \right]}$$