



# **Estudio del comportamiento y efecto del contaminante emergente diclofenaco en la cuenca del Llobregat (Cataluña), mediante su modelación en estado estacionario con GREAT-ER**

**Ingeniero de Caminos, Canales y Puertos  
Proyecto Final de Carrera – Tipo II**

**Joana Aldekoa**

**Tutor:  
Prof. Félix Francés**

# ÍNDICE

---

## 1. Introducción

- Antecedentes
- Objetivos

## 2. Diclofenaco

## 3. Cuenca del Llobregat

## 4. GREAT-ER

## 5. El modelo

- Escenarios
- Datos de entrada
- Calibración
- Resultados

## 6. Discusión

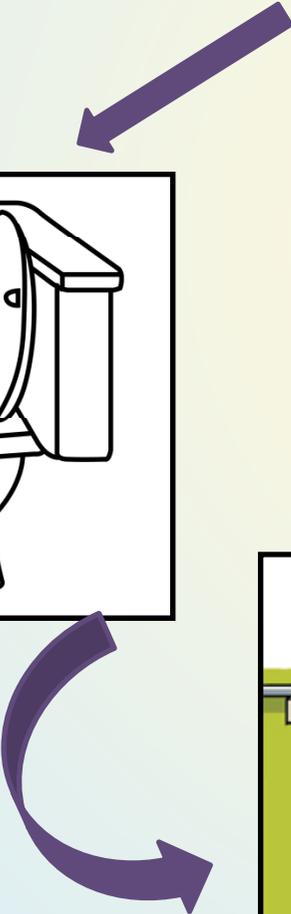
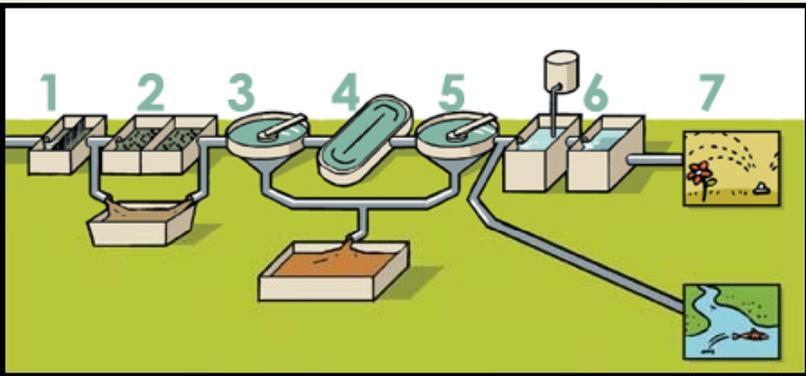
## 7. Conclusiones

# INTRODUCCIÓN

## ANTECEDENTES



## CONTAMINANTES EMERGENTES



# INTRODUCCIÓN

---

## ANTECEDENTES

Falta de datos precisos y consistentes sobre contaminantes emergentes

Necesidad de identificar las áreas con un riesgo ambiental significativo

```
graph TD; A[Falta de datos precisos y consistentes sobre contaminantes emergentes] --> B[MODELACIÓN]; C[Necesidad de identificar las áreas con un riesgo ambiental significativo] --> B; B --> D[Simular en el tiempo y espacio la distribución de estos contaminantes]
```

**MODELACIÓN**

Simular en el tiempo y espacio la distribución de estos contaminantes

# INTRODUCCIÓN

---

## OBJETIVO

Implementación del modelo **GREAT-ER** sobre la **cuenca del Llobregat** con el fin de estudiar el comportamiento del contaminante emergente **diclofenaco**.

# COMPONENTES DEL MODELO

**MODELO**

Diclofenaco

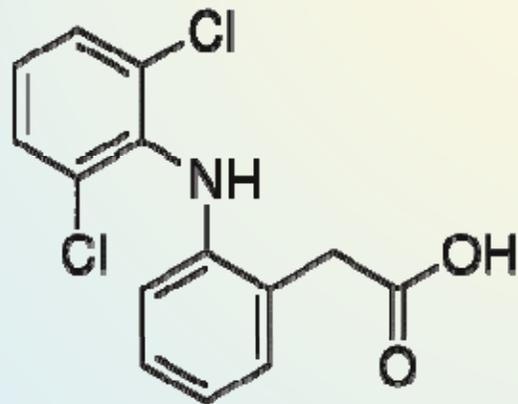
Cuenca del Llobregat

GREAT-ER

# DICLOFENACO

## EL CONTAMINANTE EMERGENTE: DICLOFENACO

- Medicamento antiinflamatorio no esteroide (AINE)
- Está incluido como sustancia prioritaria en la propuesta de 2012 a la DMA (2000/60/EC)
- La información acerca de este fármaco es muy variada e imprecisa



# DICLOFENACO

## CONSUMO

– Agencia Española de Medicamentos y Productos Sanitarios, 2007

Año	1992	1993	1994	1995	1996	1997	1998
DDD/1000 hab./día	6.74	6.35	6.31	6.39	6.3	6.33	6.54
1999	2000	2001	2002	2003	2004	2005	2006
7.6	7.89	7.57	7.52	7.59	7.84	7.33	7.87

# DICLOFENACO

## METABOLIZACIÓN EN EL CUERPO HUMANO

- Tras la metabolización en el cuerpo humano, compuestos inalterados y conjugados del diclofenaco son expulsados mediante la orina y heces.

<b>Autores</b>	<b>Diclofenaco Inalterado</b>	<b>Diclofenaco Conjugado</b>
M. Carballa et al., 2008	1-15%	1-60%
D. Bendz et al., 2005	15%	<1%
A. C. Johnson et al., 2007	7.50%	s.d.
J. Lienert et al., 2007	6-26%	45-85%
H. T. Scheneider et al, 1990	12.66%	22.07%
T. L. Laak et al, 2010	6-26%	s.d.
A. Pal et al., 2010	6-39%	s.d.

# DICLOFENACO

---

## DEGRADACIÓN EN DEPURADORAS

- La eficiencia es función de las propiedades físico-químicas del compuesto en sí y de los tratamientos específicos de cada planta.

---

<b>Autores</b>	<b>Eliminación EDARs %</b>
A. C. Johnson et al., 2007	0-75
J. Lienert et al., 2007	<6
D. Bendz et al., 2005	17-69
C. Miege et al., 2009	32
T. Heberer, 2002	17
C. Ort et al., 2009	25
K. M. Onesios et al., 2009	7-80

---

# DICLOFENACO

## DEGRADACIÓN Y SORCIÓN EN EL MEDIO NATURAL

K (d-1)	Autor	Valor Min.	Valor Max.	Medio
<b>Fotodegradación</b>	Buser et al. (Lago Greifensee)	0.022	0.081	0.0515
	Buser et al. (Modelo GCSOLAR)	0.006	0.14	0.068
	Buser et al. (Exper. Laboratorio)	19.2	19.2	19.2
	Tixier et al. (Mediciones Campo)	0.07	0.094	0.088
	Radke et al. (Exper. In-situ)	0.28	0.46	0.37
	Osorio et al. (modelo flujo de tapón)	1.2	1.2	1.2
<b>Biodegradación</b>	Buser et al. (Exper. Incubación)	0.004	0.004	0.004
<b>Sedimentación</b>	Tixier et al. (Mediciones Campo)	0.005	0.005	0.005
<b>Global</b>		<b>0.015</b>	<b>19.209</b>	<b>3.505</b>

# DICLOFENACO

---

## IMPACTOS MEDIOAMBIENTALES

- Toxicidad en ciertos pájaros
- Alteraciones en microistemas de biofilm
- Efectos sub-letales en daphnias y embriones de peces
- Puede introducirse en las redes de suministro de agua potable



# COMPONENTES DEL MODELO

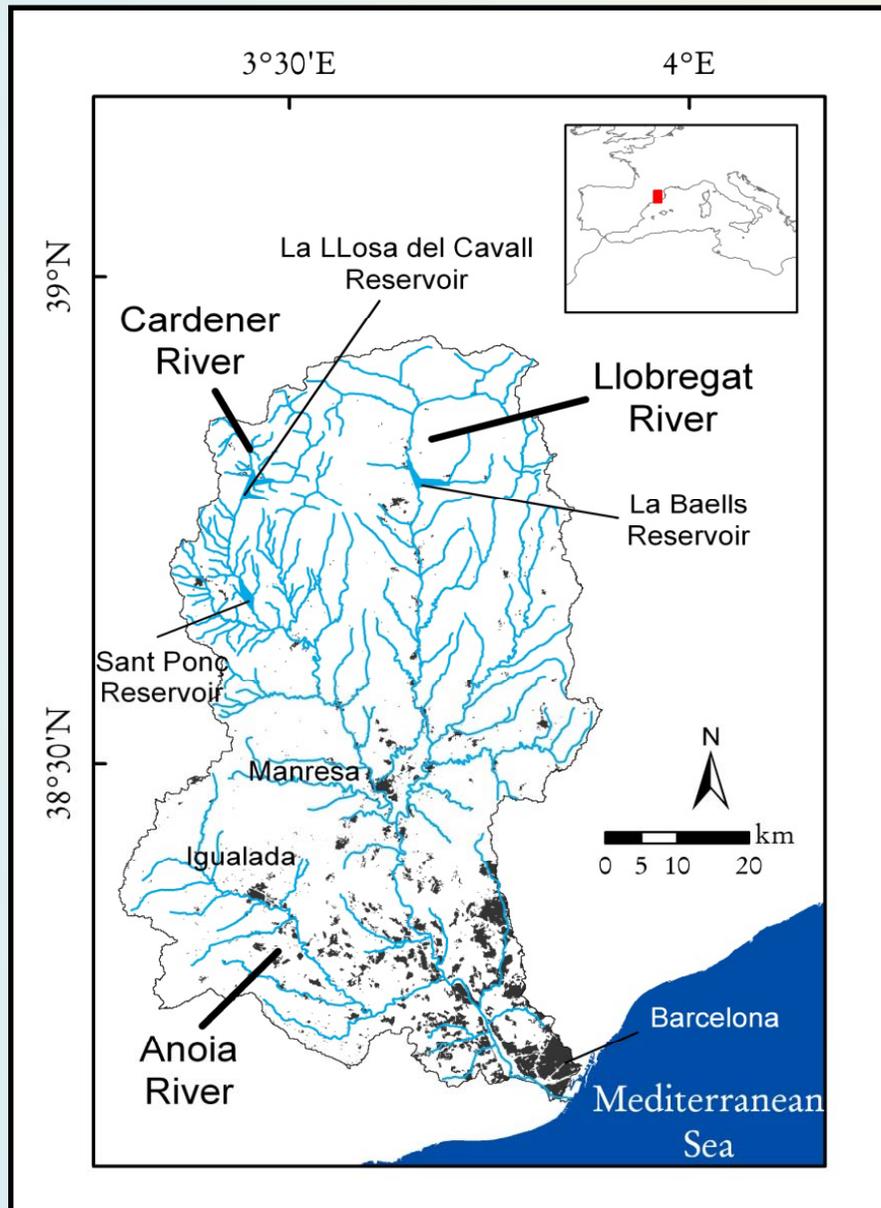
**MODELO**

Diclofenaco

Cuenca del Llobregat

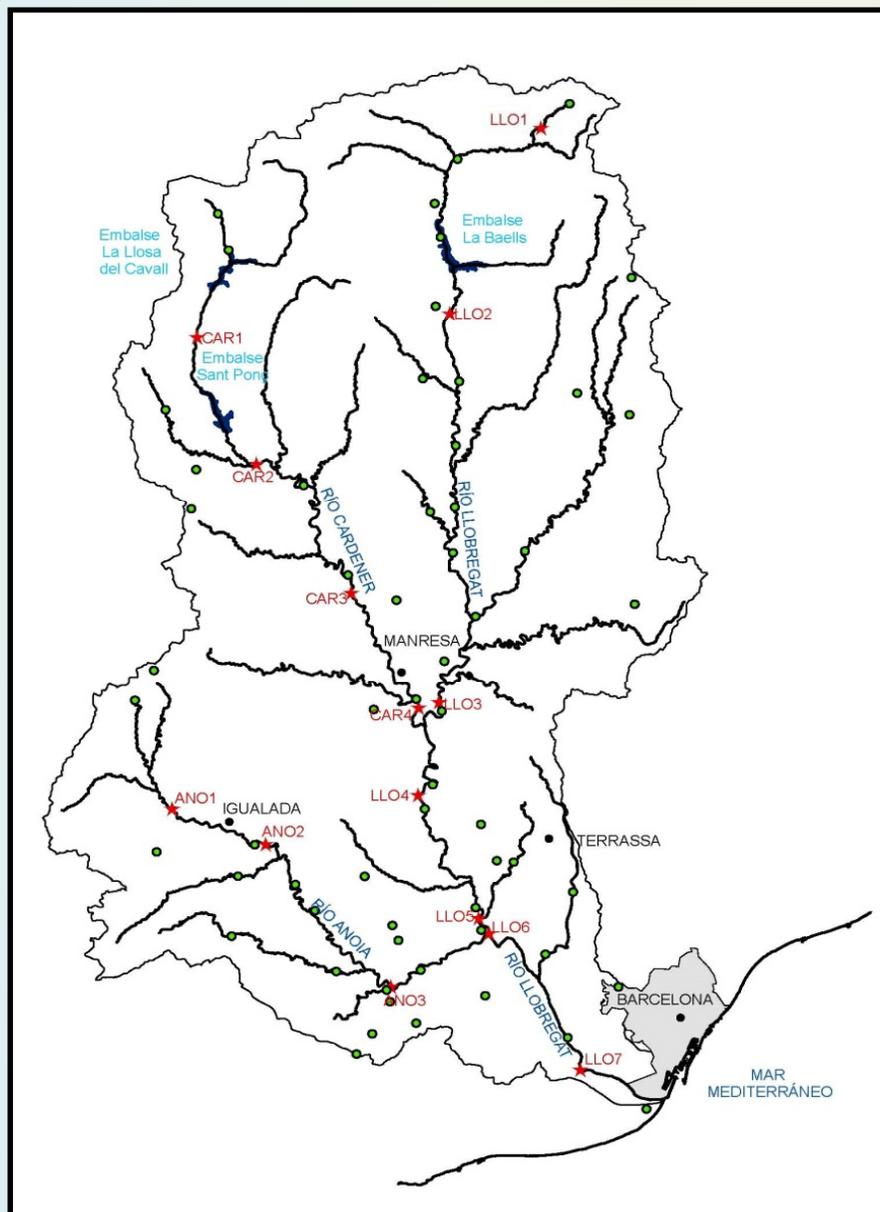
GREAT-ER

# CUENCA DEL LLOBREGAT



- Área: 4.948 km<sup>2</sup>
- Precipitación media anual: 673 mm
- Volumen medio de descarga anual: 141 hm<sup>3</sup>

# CUENCA DEL LLOBREGAT



● EDAR

★ Punto de muestreo

## Campañas SCARCE

- Septiembre 2010
- Septiembre 2011

# COMPONENTES DEL MODELO

**MODELO**

Diclofenaco

Cuenca del Llobregat

GREAT-ER

# GREAT-ER

---

## EL MODELO GREAT-ER

**Objetivo**



Predecir las concentraciones de contaminantes emergentes en ríos

**Modelo**



Estacionario



Determinístico

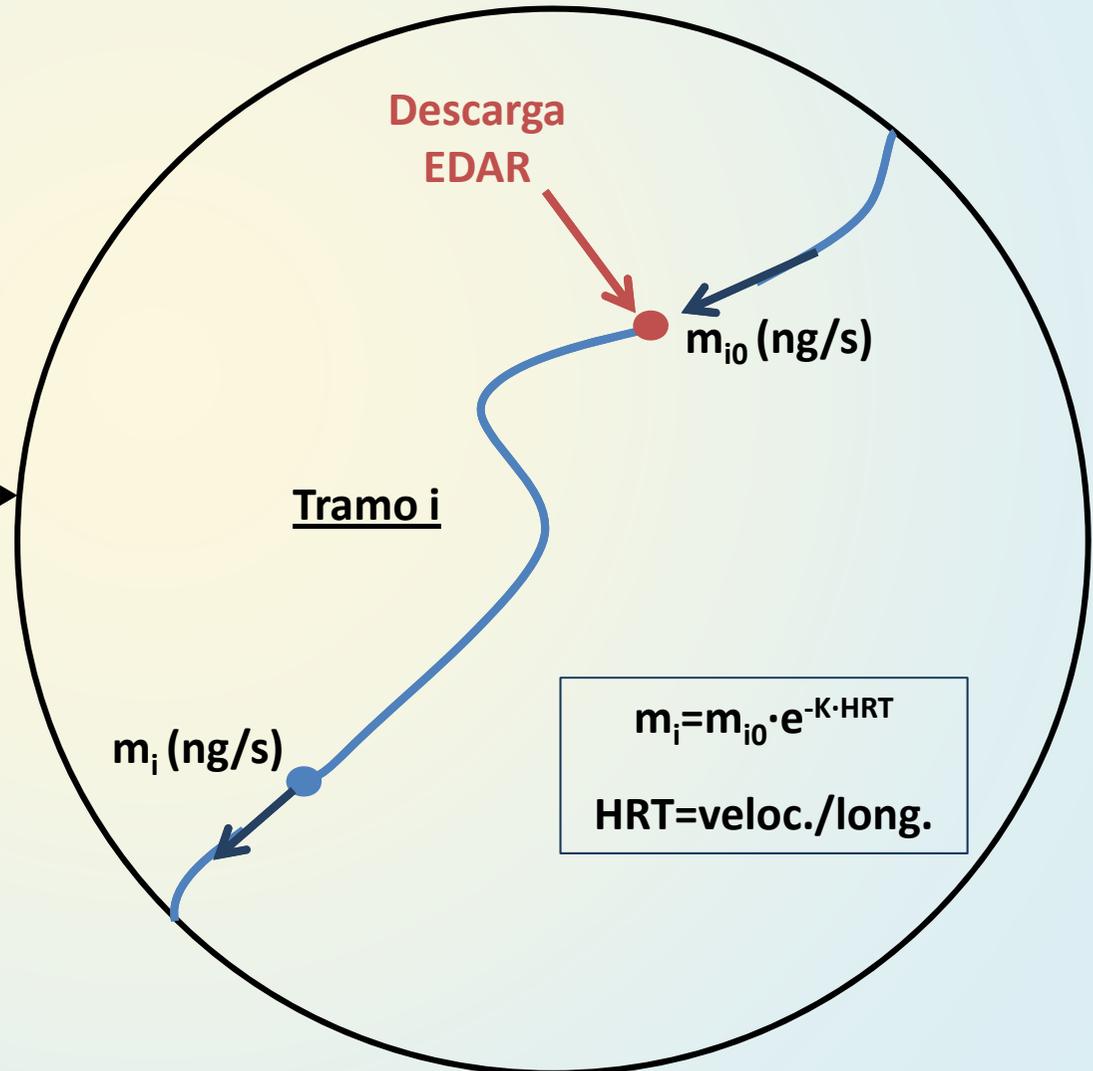
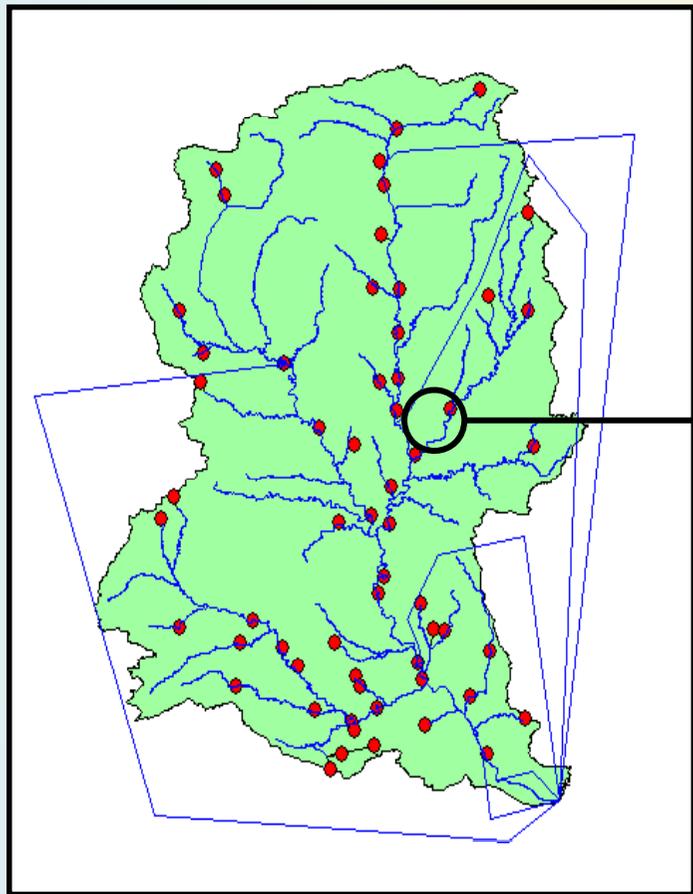


Enfoque estocástico



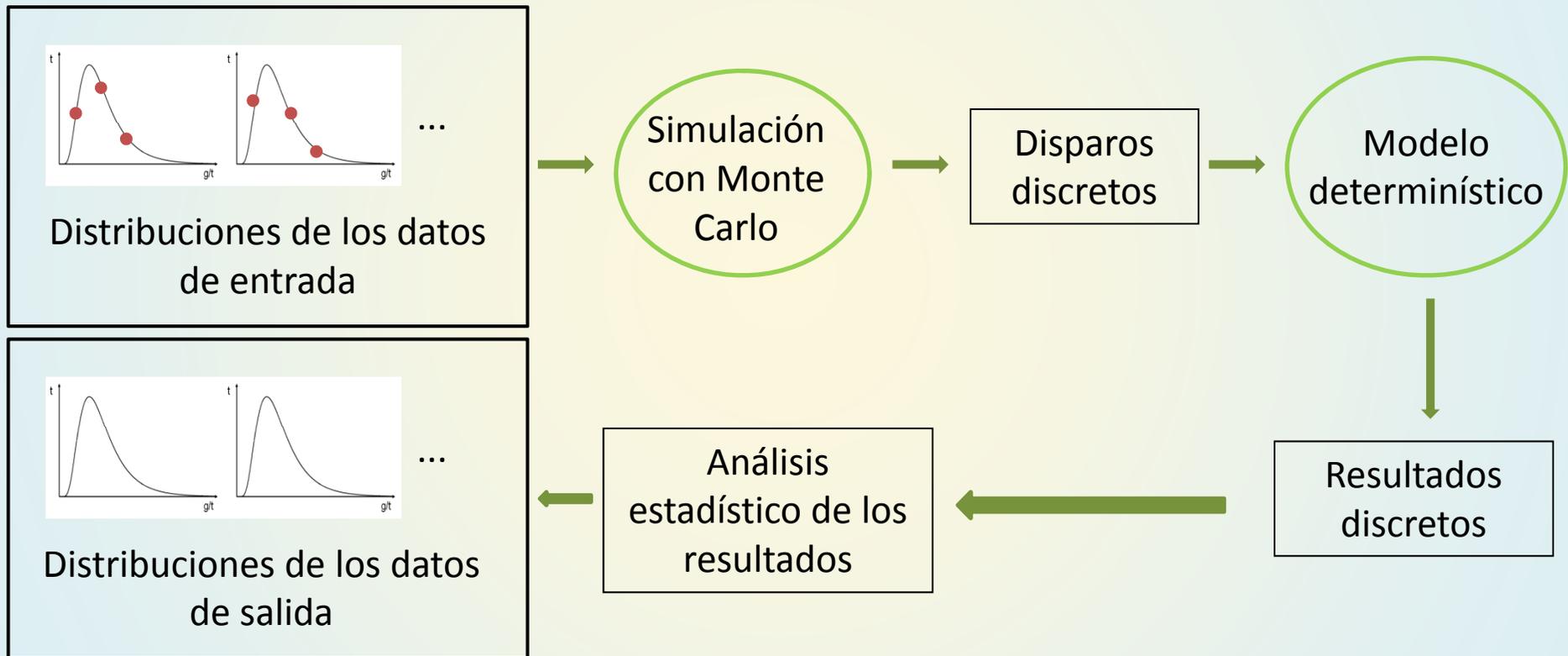
Método de Monte Carlo

## MODELO DETERMINÍSTICO



# GREAT-ER

## MODELO ESTOCÁSTICO



Enfoque estocástico

Enfoque determinístico

# EL MODELO

---

ESCENARIOS



DATOS DE ENTRADA



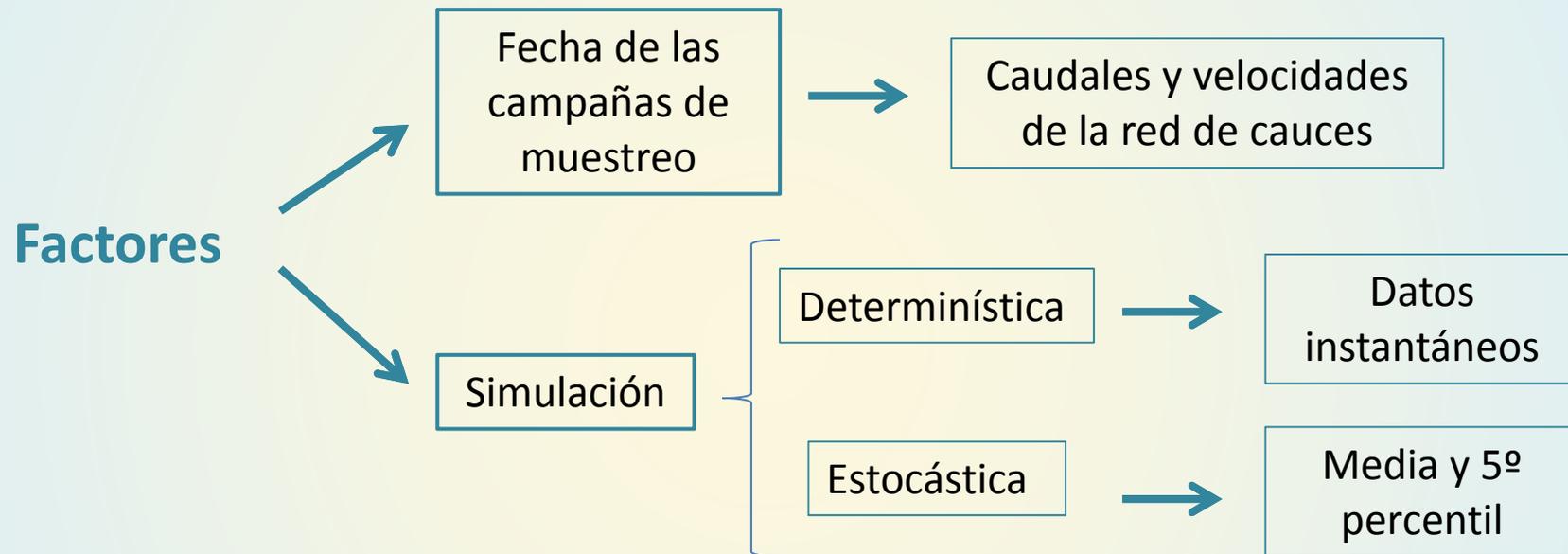
CALIBRACIÓN



RESULTADOS

# EL MODELO

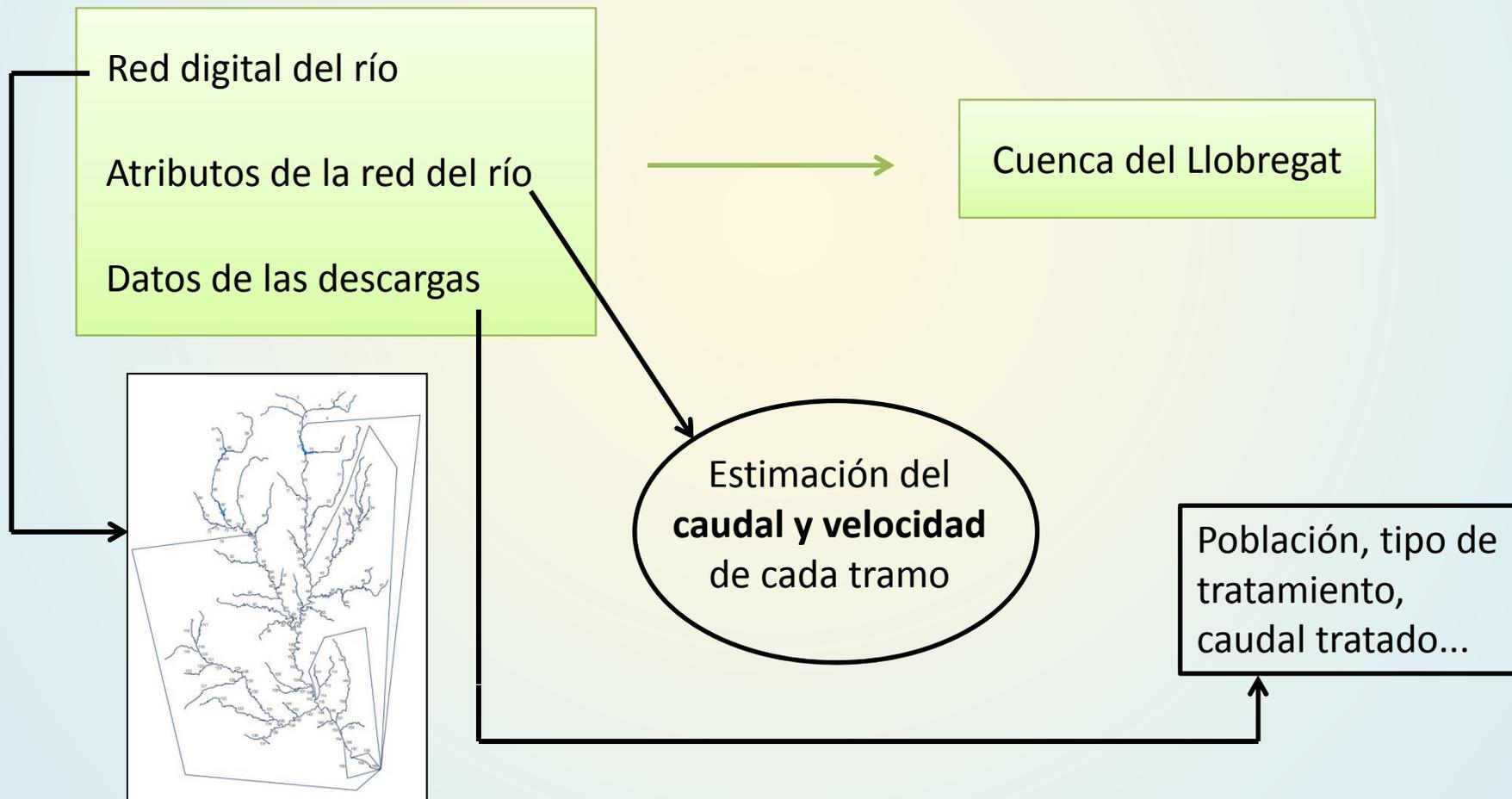
## ESCENARIOS



Escenarios	Determinístico	Estocástico
Septiembre 2010	1	3
Septiembre 2011	2	4

# EL MODELO

## DATOS DE ENTRADA



# EL MODELO

---

## DATOS DE ENTRADA

Red digital del río

Atributos de la red del río

Datos de las descargas



Cuenca del Llobregat

Descarga del contaminante

Eliminación en depuradoras

Constante de degradación natural



Diclofenaco

# EL MODELO

---

## CALIBRACIÓN

Dos campañas de muestreo en 14 puntos de la cuenca



**AJUSTE**



DOS PARÁMETROS:

**Descarga unitaria de diclofenaco:**

$$D_u = \text{Consumo} \cdot F_{\text{Excreción}} \cdot (1 - F_{\text{EliminaciónEDARs}})$$

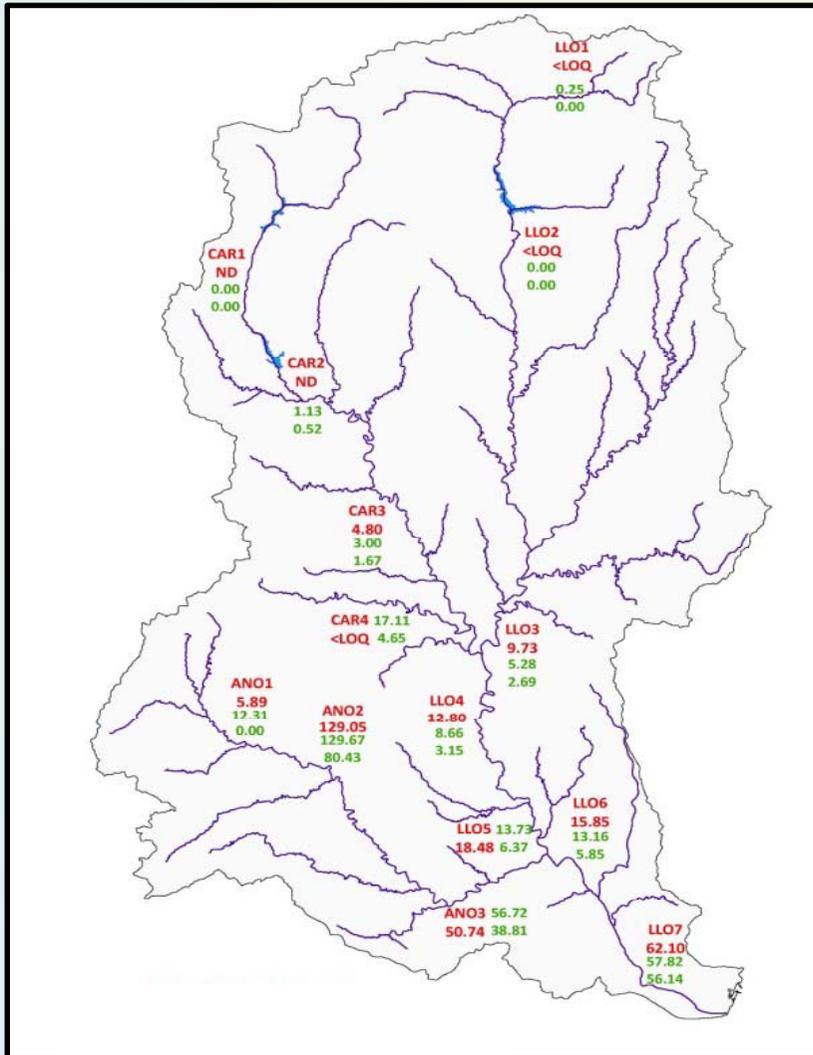
$$\text{Consumo}(2006) = 2.879 \cdot 10^{-6} \text{ kg/cap/año}$$

**Constante de degradación natural  
del diclofenaco (K)**

$$0.010-20 \text{ d}^{-1}$$

# EL MODELO

## RESULTADOS DE CALIBRACIÓN



### ESCENARIO 3

(campana 2010, estocástico)

**4.80** – Valor observado en muestras

**3.00** – Valor simulado (media y desviación estándar)

**<LOQ** – Por debajo del límite de cuantificación

**ND** – No detectado

# EL MODELO

## RESULTADOS DE CALIBRACIÓN

### Parámetros calibrados

#### Descarga Unitaria Diclofenaco

Escenario	1	2	3	4
$D_U$ (kg/cap/año)	7.81E-05	2.29804E-05	1.5799E-05	1.43628E-05

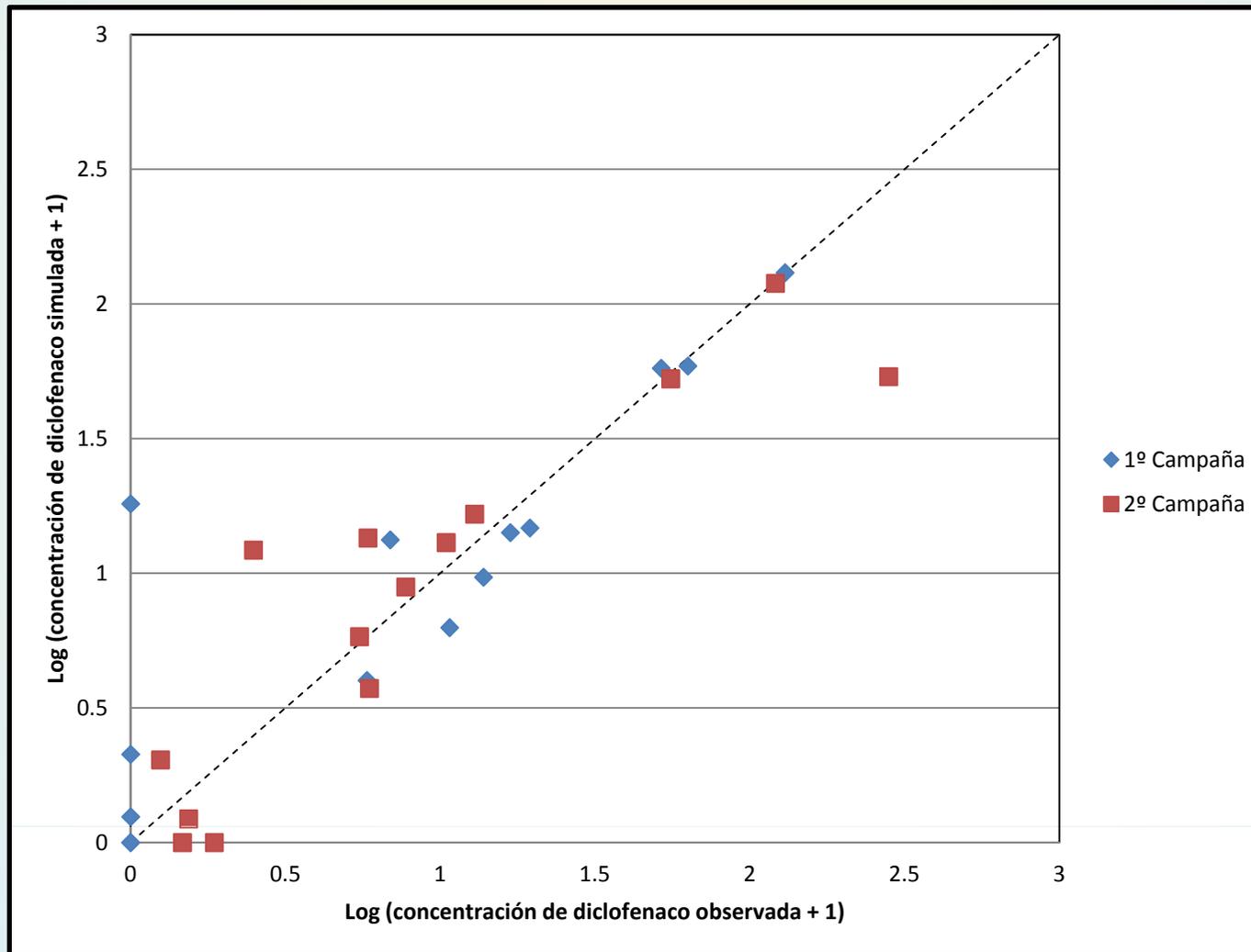
 **2-10%·Consumo(2006)**

#### Constante Degradación Natural Diclofenaco

Escenario	1	2	3	4
$K$ (d <sup>-1</sup> )	1.5	1.2	0.9	0.9

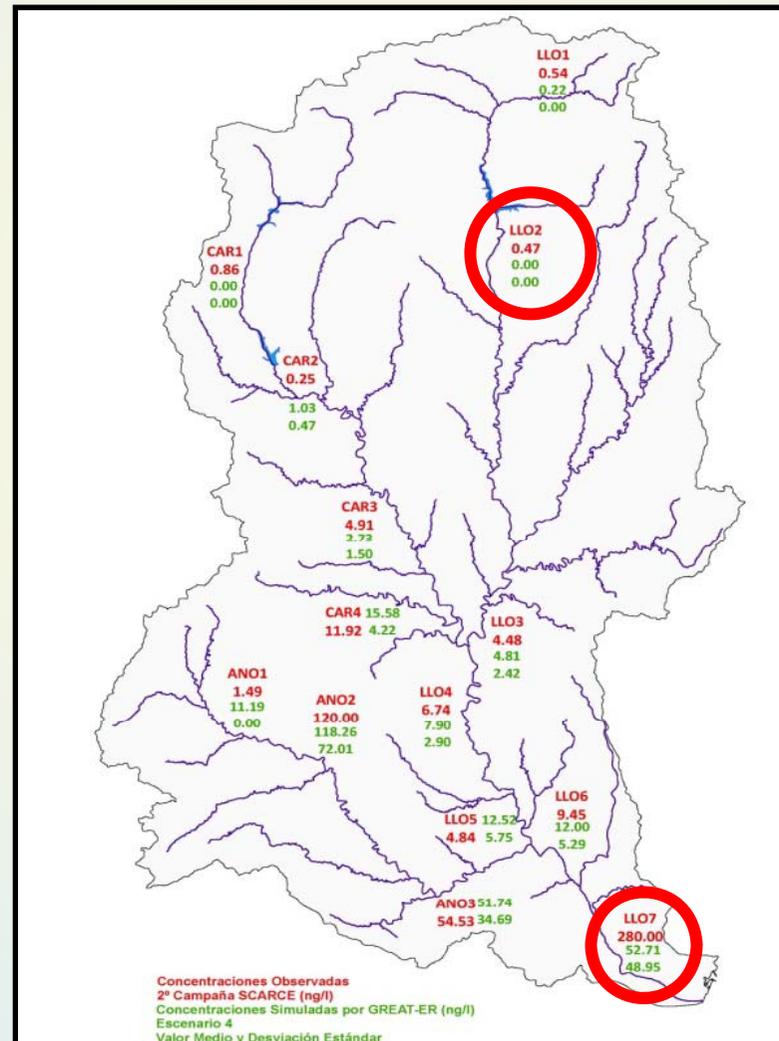
# DISCUSIÓN

## PRECISIÓN DE LOS RESULTADOS



# DISCUSIÓN

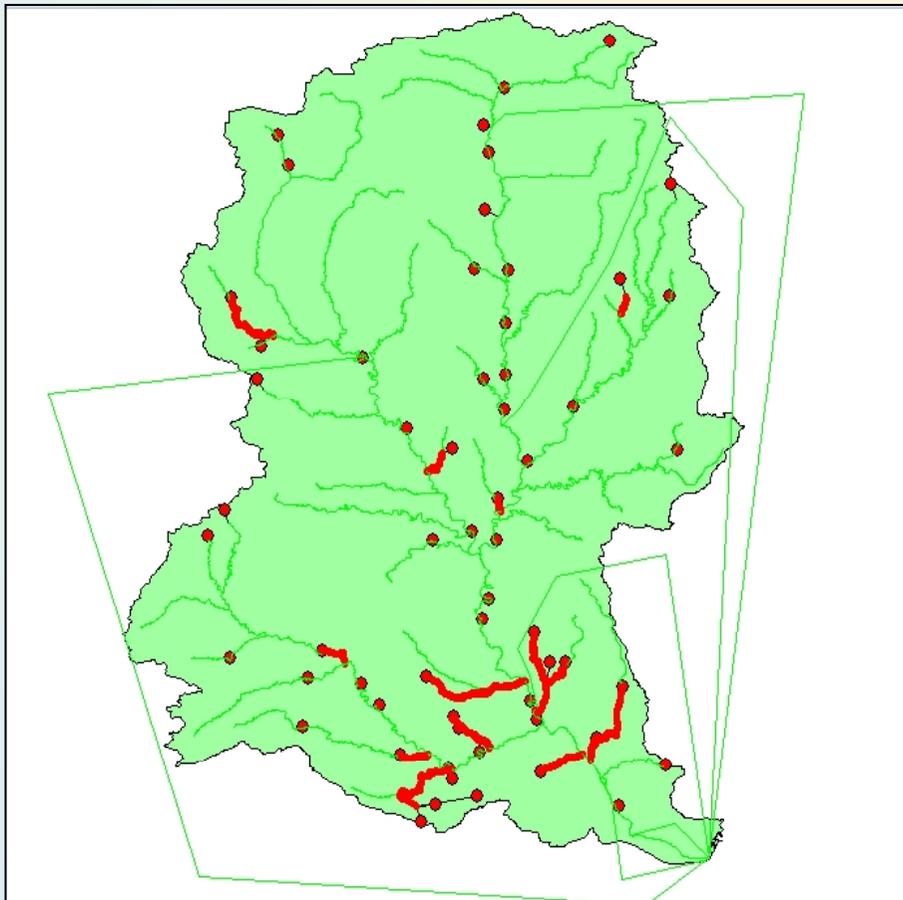
## PRECISIÓN DE LOS RESULTADOS



# DISCUSIÓN

## ANÁLISIS DE RIESGO EN ESCENARIO 4

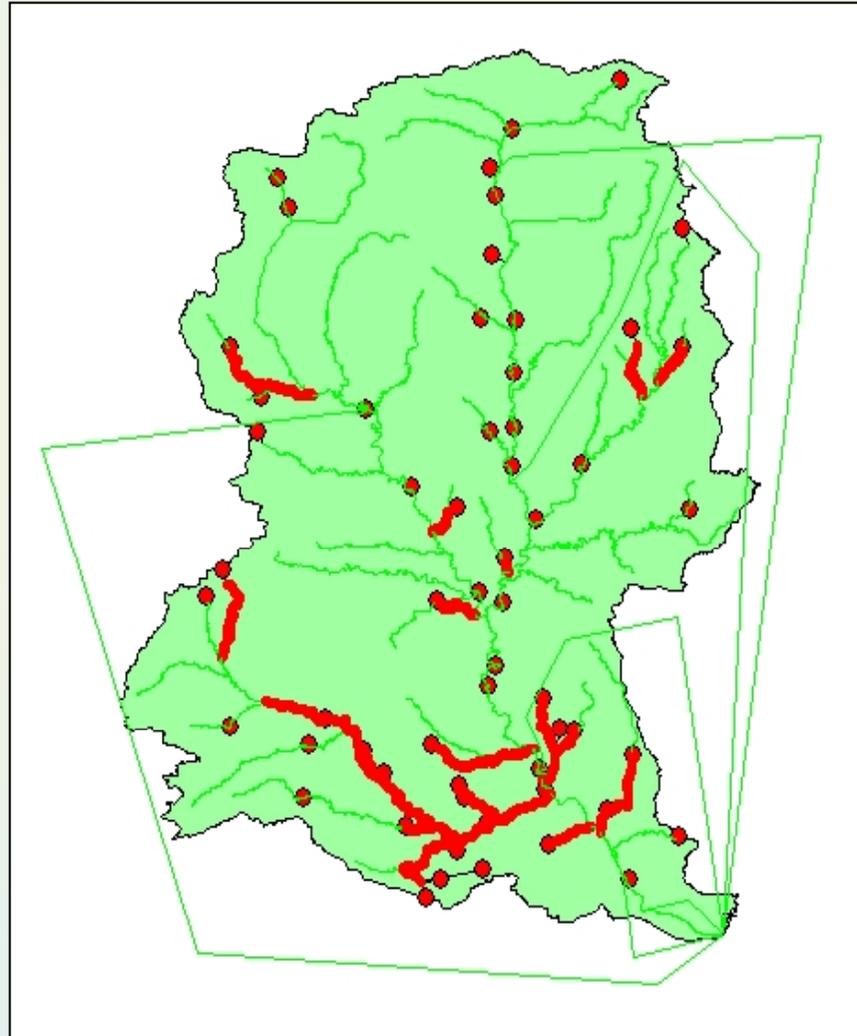
– Diclofenaco —————> sustancia prioritaria para DMA (2000/60/EC)



↓  
promedio anual en  
aguas interiores  
superficiales:  
0.1 µg/l

# DISCUSIÓN

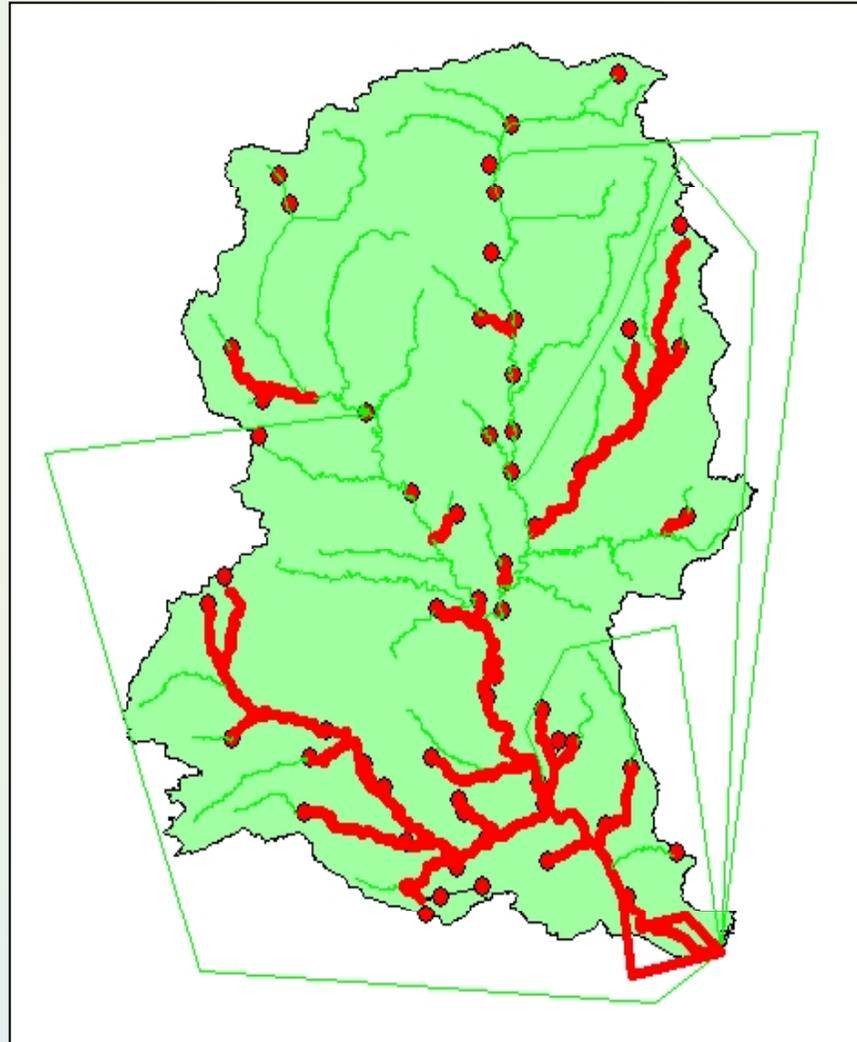
## ANÁLISIS DE RIESGO EN ESCENARIO 4



consumo de  
 $3 \cdot 10^{-5}$   
kg/cap/año

# DISCUSIÓN

## ANÁLISIS DE RIESGO EN ESCENARIO 4



consumo de  
 $28 \cdot 10^{-5}$   
kg/cap/año

# CONCLUSIONES

---

- Atendiendo al criterio del menor error cuadrático medio se ha obtenido un ajuste de los cuatro escenarios bastante aceptable
- Se ha **acotado considerablemente** el intervalo inicialmente considerado para la constante de degradación **K**
- La descarga unitaria de diclofenaco calibrada **permite estimar la cantidad de contaminante que se pierde** desde el consumo hasta el vertido por la depuradora
- La limitación más clara para la construcción y desarrollo de este modelo ha sido la **falta de datos suficientes y precisos**
- El modelo GREAT-ER podría ser una **herramienta útil** para **predecir las concentraciones de contaminantes emergentes** a escala de cuenca

# OTROS

---

***3<sup>rd</sup> International SCARCE Conference***

*Noviembre 2012*

Presentación en poster del proyecto

***KTH Royal Institute of Technology***

***Stockholm***

*Marzo 2013*

Land and Water Resources

Engineering

***Journal of Hazardous Materials***

*Abril 2013*

Redacción de un artículo

Actualmente aceptado y en proceso  
de publicación



**GRACIAS  
POR SU ATENCIÓN**

**Joana Aldekoa**

**Tutor:  
Prof. Félix Francés**