

MODELACIÓN MATEMÁTICA DE LA CONCENTRACIÓN DE BTEX EN LA ZONA NO SATURADA: EVALUACIÓN DE LA DISTRIBUCIÓN DE MASA ENTRE LAS FASES

**Javier RODRIGO ILARRI*, Luis ROMERO BALLESTEROS* y
M^a Elena RODRIGO CLAVERO***

(*) Instituto de Ingeniería del Agua y Medio Ambiente (IIAMA), Universitat Politècnica de València. Camino de Vera s/n, 46022, Valencia (España) jrodrigo@upv.es

RESUMEN

El impacto del vertido de hidrocarburos en la zona no saturada es uno de los aspectos medioambientales a evaluar en multitud de localizaciones donde la contaminación se produce a partir de fugas en tanques de almacenamiento subterráneo de combustible. La utilización de modelos de flujo y transporte en zona no saturada se plantea como una herramienta que permite la comprensión del comportamiento de los BTEX en el subsuelo bajo distintos escenarios. En este trabajo se presentan los resultados obtenidos al utilizar un modelo sencillo en diferencias finitas que describe el movimiento de contaminantes orgánicos en la zona vadosa. El modelo considera la masa total de contaminante dividida en tres fases: 1) en disolución en el agua subterránea, 2) como gas en la fase vapor y 3) absorbido en la fase sólida del suelo. Los resultados obtenidos se refieren a un conjunto de escenarios donde se muestra la distribución de la masa total de contaminantes en las tres fases. Se realiza un análisis de sensibilidad de los parámetros del modelo ante un hipotético vertido de BTEX desde un tanque subterráneo de almacenamiento de combustible.

Palabras clave: *BTEX, zona vadosa, modelación, contaminación de suelos*

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

El Real Decreto 9/2005 de 14 de enero, por el que se establece la relación de actividades potencialmente contaminantes del suelo y los criterios y estándares para la declaración de suelos contaminados es el documento legislativo más relevante en materia de contaminación de suelos en España. En él, se define la lista de actividades potencialmente contaminantes de los suelos y el establecimiento de los criterios para considerar que un suelo está contaminado. Los niveles genéricos de referencia se establecen en función del tipo de afección: a la salud humana (Anexo V del R.D. 9/2005) y ecosistemas (Anexo VI del R.D. 9/2005). El objetivo principal del presente trabajo es estudiar la aplicación de VLEACH (RAVI & JOHNSON, 1997), un modelo matemático unidimensional, para cuantificar las concentraciones de contaminantes orgánicos BTEX en la zona no saturada. Se pretende verificar la aplicación del modelo como herramienta

de apoyo en el estudio de la contaminación de suelos de acuerdo a la luz de la normativa española en vigor utilizando el modelo para evaluar la contaminación en la zona no saturada ocasionada por una hipotética fuga procedente de un tanque de almacenamiento subterráneo de combustible.

CARACTERÍSTICAS PRINCIPALES DE LOS BTEX COMO CONTAMINANTES DEL SUELO Y LAS AGUAS SUBTERRÁNEAS

Se conoce como BTEX a un conjunto de compuestos químicos orgánicos aromáticos integrados por el benceno, el tolueno, el etilbenceno y el xileno. Estos compuestos se encuentran en la gasolina, formando gran parte de la fracción soluble de ésta. Todos ellos son considerados compuestos tóxicos y peligrosos y se incluyen como tales en la lista de elementos susceptibles de análisis de acuerdo al R.D. 9/2005. Como estos cuatro compuestos que forman el BTEX son la mayor parte de la fracción soluble de la gasolina, el estudio de problemas medioambientales asociados a la gasolina implica directamente el estudio del BTEX. Una de las formas más comunes de contaminación por gasolina detectada a lo largo de los años, es la fuga de ésta procedente de tanques de almacenamiento enterrados en el subsuelo, principalmente ubicados en gasolineras (FETTER, 1999).

El estudio de la cantidad de contaminante retenido en cada una de las fases del suelo se fundamenta en la determinación de los coeficientes de reparto, los cuales determinan la cantidad o concentración de una determinada sustancia cuando se encuentra en una mezcla de fases, ya sea en fase sólida, líquida, gaseosa o NAPL. Los coeficientes de reparto comúnmente utilizados son el coeficiente de distribución (K_d), el coeficiente de presión de vapor (VP), la solubilidad (Sol) y la constante de Henry (K_H).

Si se desprecia el efecto de la adsorción del contaminante en la fracción más fina del suelo (BRUSSEAU y RAO, 1989), el coeficiente K_d puede estimarse a partir de K_{oc} , coeficiente de partición en carbono orgánico [ml/g] y f_{oc} , la fracción de contenido orgánico del suelo ($K_d = K_{oc} f_{oc}$). Estos coeficientes de reparto están relacionados con el coeficiente de partición octanol-agua, K_{ow} , que puede ser estimado experimentalmente en laboratorio para cada contaminante (BANERJEE et al., 1980).

La Tabla 1 muestra los valores de los diferentes coeficientes de reparto para los compuestos BTEX (LYMAN et al., 1990 y SCHWARZENBACH et al., 1993). Los valores de solubilidad y presión de vapor fueron obtenidos a 20°C y los valores del coeficiente octanol-agua a 25°C.

Compuesto	P. molecular (g/mol)	Solubilidad (mg/L)	Presión de vapor (atm)	log K_{ow}
Benceno	78.11	1780	0.125	2.13
Etilbenceno	106.17	152	0.0125	3.10
Tolueno	92.14	515	0.037	2.69
Tolueno	106.17	175	0.0087	3.12

Tabla 1. Coeficientes de reparto y log K_{ow} de los compuestos del BTEX

DESCRIPCIÓN DEL MODELO UTILIZADO

El modelo escogido para simular el comportamiento de los BTEX es VLEACH, un modelo sencillo que permite simular el transporte vertical unidimensional de la contaminación por contaminantes orgánicos en la zona vadosa, sin requerir de la calibración de un número excesivo de parámetros, resolviendo la ecuación del transporte mediante diferencias finitas. VLEACH simula el transporte vertical de forma simplificada. Para la fase líquida se modela únicamente el mecanismo de transporte por advección. Para la fase gaseosa se modela el mecanismo de difusión. En cuanto a la discretización espacial, el modelo considera utiliza polígonos verticales, divididos en celdas. Debe tenerse en cuenta que, dentro de cada polígono, todas las condiciones son homogéneas, a excepción de la concentración de contaminantes que puede variar de una celda a otra. Inicialmente, el modelo realiza un balance de la masa de contaminante presente en cada una de las tres fases.

El transporte advectivo en fase líquida se calcula a partir de la infiltración y el contenido volumétrico de agua que existe en el suelo. El transporte por difusión de la fase gaseosa se calcula a través de los gradientes de concentración entre diferentes celdas. Los cálculos del balance de masa son reequilibrados tras los cálculos del transporte para cada paso de tiempo y en cada polígono, que son simulados independientemente. Cuando finaliza el periodo de simulación, los resultados son agrupados para cada polígono y se puede determinar el grado de afección a la zona vadosa, la cantidad que ha migrado en la frontera con el nivel freático hacia la zona saturada y la cantidad de contaminante que ha migrado en forma de vapor por la superficie a la atmósfera.

VLEACH divide la masa de contaminante en tres fases: gaseosa, líquida y sólida, caracterizándolas a lo largo del espacio (z) y del tiempo (t), evaluando los correspondientes valores C_l , C_s , C_g . Los cálculos se inician considerando que toda la masa de contaminante está disuelta en la fase líquida:

$$C_l(z, 0) = M(z, 0) \frac{\rho_b}{\theta} \quad [1]$$

donde $C_l(z,0)$ es la concentración inicial de contaminante en la fase líquida [g/ml], $M(z,0)$ es la masa inicial de contaminante por unidad de masa de suelo [$\text{g}_{\text{cont}}/\text{g}_{\text{suelo}}$], θ es contenido volumétrico de agua [%] [$V_{\text{agua}}/V_{\text{total}}$] y ρ_b es la densidad aparente del suelo [g/cm^3].

La ecuación unidimensional del transporte considerada en el modelo es:

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} = -\frac{q}{\theta} \frac{\partial C_l}{\partial z} \quad [2]$$

La variación de la concentración de contaminante en fase gaseosa con el tiempo se obtiene utilizando la segunda ley de Fick:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 C_g}{\partial z^2} \quad [3]$$

donde C_g es la concentración de contaminante en la fase gaseosa [g/ml], D^* es el coeficiente de difusión efectiva del contaminante en fase gas sólo en los poros llenos de aire [$\text{m}^2/\text{día}$]. La obtención del coeficiente de difusión efectiva se realiza a partir de:

$$D^* = D_{\text{air}} \frac{(\phi - \theta)^{7/3}}{\phi^2} \quad [4]$$

Para la resolución de la ecuación [3] se parte de la ecuación de MILLINGTON (1959) que estima la difusión gaseosa en el medio poroso:

$$D_e = D_{\text{air}} \frac{(\phi - \theta)^{10/3}}{\phi^2} \quad [5]$$

El coeficiente D_e es el coeficiente de difusión del gas en todo el medio poroso y D_{air} es el coeficiente de difusión gaseosa en aire libre. La relación entre el coeficiente de difusión efectiva y el coeficiente de difusión gaseosa en el medio poroso es la siguiente:

$$D_e = (\phi - \theta)D^* \quad [6]$$

El modelo calcula la masa total de contaminante por unidad de volumen de suelo $M_T(z,t)$:

$$M_T(z, t) = [\theta C_l + (\phi - \theta)C_g + \rho_b C_s] \quad [7]$$

y las concentraciones en cada fase en función de la masa total y de la constante de Henry (K_H) y el coeficiente de distribución (K_d) que relaciona la concentración de contaminante en fase sólida y en fase líquida. El coeficiente K_d puede estimarse a partir de K_{oc} , coeficiente de partición en carbono orgánico [ml/g] y f_{oc} , la fracción de contenido orgánico del suelo:

$$K_d = K_{oc}f_{oc} \quad [8]$$

De esta forma, las concentraciones en las fases gaseosa, líquida y sólida se obtienen mediante las expresiones siguientes:

$$C_s(z, t) = \frac{K_d M_T(z, t)}{[\theta + (\phi - \theta)K_H + K_d \rho_b]} \quad [9]$$

$$C_l(z, t) = \frac{M_T(z, t)}{[\theta + (\phi - \theta)K_H + K_d \rho_b]} \quad [10]$$

$$C_g(z, t) = \frac{K_H M_T(z, t)}{[\theta + (\phi - \theta)K_H + K_d \rho_b]} \quad [11]$$

PLANTEAMIENTO DE LA MODELACIÓN Y CALIBRACIÓN DE PARÁMETROS

La aplicación práctica consiste en la modelización de una posible fuga de hidrocarburos procedentes de un tanque subterráneo de una estación de servicio sintética situada en el término municipal de Aldaia (Valencia). Para ello, se analiza el transporte de contaminantes que se produce en la zona no saturada del suelo, evaluándose independientemente la afección a la zonas no saturada y saturada.

El municipio de Aldaia está asentado sobre materiales sedimentarios del Cuaternario Superior. En la zona de estudio se pueden encontrar los siguientes materiales: conglomerados, gravas, arenas, areniscas, limos y arcillas. Para alcanzar el nivel freático correspondiente al acuífero superior de la Plana de Valencia Norte, se debe profundizar más de 30 metros. El perfil litológico del terreno se ha obtenido de acuerdo con los estudios previos realizados por el IGME

y el MAPAMA. El área de simulación de la contaminación procedente del tanque subterráneo es de 100 m². El inicio la simulación coincide con el fondo del tanque, situado a 3,5 metros bajo la superficie del terreno. El planteamiento de los posibles escenarios de contaminación del suelo se realiza considerando los siguientes criterios de análisis:

- Fuga continua de combustible.
- Análisis de la capa más superficial del suelo (limos) o de la totalidad de la zona vadosa.
- Nivel freático medio o nivel freático extraordinariamente elevado.
- Según el contenido volumétrico de agua en la zona no saturada.

Debe tenerse en cuenta que los distintos resultados se obtienen en función del estrato analizado. Los escenarios que sólo tienen en cuenta el primer estrato de limos son útiles para caracterizar las concentraciones de contaminantes en el suelo, mientras que los escenarios donde se analiza toda la zona vadosa se utilizan para caracterizar la contaminación que llega al acuífero. Debido a que VLEACH sólo permite utilizar un único material para simular todo el terreno, se utilizan densidades secas aparentes, porosidades y contenido en materia orgánica equivalentes cuando hay más de un estrato involucrado en la simulación. Estos parámetros se estiman en proporción a la potencia de cada estrato implicado. Se definen dos clases de suelo, en función de los estratos atravesados desde la superficie hasta el nivel freático. Los valores de estos parámetros se muestran en la Tabla 2.

Suelo	Estratos	Densidad seca aparente equivalente (g/cm ³)	Porosidad equivalente	M.O. equivalente (%)
A	Limos arenosos + Gravas + Arcillas (hasta N. F. medio)	1,466	0,419	0,518
B	Limos arenosos + Gravas (hasta N. F. extraordinario)	1,613	0,374	0,615

Tabla 2. Densidad seca, porosidad y contenido en materia orgánica equivalentes para los estratos analizados

Dado que no se dispone de resultados de ensayos de campo sobre muestras de suelo, sino únicamente de la descripción de la columna litológica, para caracterizar el caso de estudio, se han escogido los valores de la conductividad hidráulica saturada para los estratos de limos arenosos (10⁻⁴ cm/s), arcillas (10⁻⁷ cm/s) y gravas (10⁻¹ cm/s), de acuerdo con las propuestas de FETTER (2001). La estimación de la conductividad hidráulica no saturada se ha realizado según la formulación de VAN GENUCHTEN (1980), a partir de la conductividad hidráulica saturada y el contenido en humedad del suelo:

$$K(\theta) = K_s \sqrt{S_e} [1 - (1 - \sqrt[m]{S_e})^m]^2 \quad [12]$$

donde θ es el contenido volumétrico de agua, θ_r es el contenido volumétrico mínimo de agua para un suelo determinado y θ_s es el contenido volumétrico de agua en saturación. Esta formulación se ha aplicado a cada estrato por separado. El parámetro m se define en GHANBARIAN-ALAVIJEH, et al. (2009) para distintos tipos de suelo. Sin embargo, no se dispone de información de este parámetro para las gravas y, por ello, sólo se ha estimado la conductividad hidráulica no saturada con esta formulación para el estrato superficial.

De esta forma, se han calculado las conductividades hidráulicas no saturadas para los distintos valores de contenido de humedad fijados en el estrato de limos arenosos. Se ha escogido un valor de 0,42 para el parámetro m de Van Genuchten, situado en el valor medio del rango que estima GHANBARIAN-ALAVIJEH, et al. (2009). El contenido volumétrico de agua mínimo se ha fijado en 0,065 y el contenido volumétrico de agua en saturación coincide con la porosidad y es igual a 0,435. Para las simulaciones que abarcan varios estratos del suelo, se ha calculado en primer lugar una conductividad hidráulica vertical saturada equivalente. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 3.

Suelo	Estratos	K_{sat} equiv. (cm/s)	$K_{no\ sat}$ equiv. (cm/s)		
			$\theta = 0,20$	$\theta = 0,25$	$\theta = 0,30$
A	Limos arenosos + Gravas + Arcillas (hasta N. F. medio)	1,466	$1,82 \cdot 10^{-7}$	$9,11 \cdot 10^{-7}$	$1,82 \cdot 10^{-6}$
B	Limos arenosos + Gravas (hasta N. F. extraordinario)	1,613	$2,39 \cdot 10^{-9}$	$1,20 \cdot 10^{-8}$	$2,39 \cdot 10^{-8}$

Tabla 3. Estimación de conductividad hidráulica saturada y no saturada para los dos tipos de suelo

LEUSCH & BARTKOW (2010), recogen rangos de porcentajes en volumen de cada uno de los componentes del BTEX en las gasolinas. En la Tabla 4 se recogen los valores utilizados en las simulaciones, teniendo en cuenta además que se cumplen los criterios de la legislación vigente en España en materia de combustibles⁴. La tabla 4 recoge además los valores de los parámetros utilizados en las simulaciones para cada contaminante según RAVI & JOHNSON (1997) y la base de datos químicos Pubchem (KIM et al., 2016).

BTEX	% volumen en gasolina	K_{oc} (ml/l)	K_H (adim)	Sol (mg/l)	D_{air} (m ² /día)	Densidad a 20 °C (g/l)
Benceno	1	58	0,221	1790	0,804	876
Tolueno	5	139	0,269	526	0,734	867
Etilbenceno	1	220	0,321	169	0,657	866
Xileno	7	350	0,244	106	0,622	861

Tabla 4. Parámetros del BTEX

El volumen de agua procedente de la lluvia se ha considerado distinto para cada uno de los tres escenarios asociados a la humedad en el terreno. Siendo 443 mm la media anual que cae sobre la zona de estudio y 923 m² el área que ocupa la gasolinera, se definen los posibles escenarios de lluvia e infiltración, considerando un 10% de pérdidas en el sistema de gestión de pluviales y de recogida de aguas de lavado de vehículos en la instalación (Tabla 5):

Contenido volumétrico de agua del terreno	Lluvia anual (mm)	Volumen precipitado anual (litros)	Volumen de recarga anual (litros)
0,20	350	323.050	64.861
0,25	450	415.350	66.707
0,30	550	507.650	68.553

Tabla 5. Volúmenes anuales de agua precipitados e infiltrados

El escenario de fuga continua considera los fallos de las juntas y los pequeños derrames a la hora de realizar las acciones de llenado del depósito. Se asume una fuga de 2.000 litros de combustible al año. El volumen de cada contaminante que se recarga anualmente y la concentración de cada uno de ellos en función de la lluvia anual se muestra en la Tabla 6.

⁴ Real Decreto 61/2006, de 31 de enero, por el que se determinan las especificaciones de gasolinas, gasóleos, fuelóleos y gases licuados del petróleo y se regula el uso de determinados biocarburantes

BTEX	Volumen fuga anual (litros)	Concentración (mg/l)		
		P= 350 mm	P = 450 mm	P = 550 mm
Benceno	20	248	255	262
Tolueno	100	1.229	1.262	1.297
Etilbenceno	20	245	252	259
Xileno	140	1.709	1.754	1.803

Tabla 6. Escenarios de fuga continua. Concentraciones de cada contaminante en función de la precipitación

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

A continuación, se muestran los resultados obtenidos para el caso de fuga continua en los 12 primeros metros de profundidad, es decir, en el estrato más superficial (limos). En la Figura 2 se representan las concentraciones de BTEX en fase sólida considerando tres posibles conductividades contenidas volumétricas de agua o humedades (θ) y, en consecuencia, tres conductividades (K) asociadas. En dicha Figura 2 la línea vertical roja representa el límite máximo admisible para suelo industrial de concentración de cada BTEX en el suelo según el R.D. 9/2005. En el caso del benceno, para valores bajos de θ se aprecia un avance muy lento de la contaminación. Tras 50 años desde el comienzo de la fuga, solo se rebasa el límite del R. D. 9/2005 en los 2 primeros metros bajo el tanque.

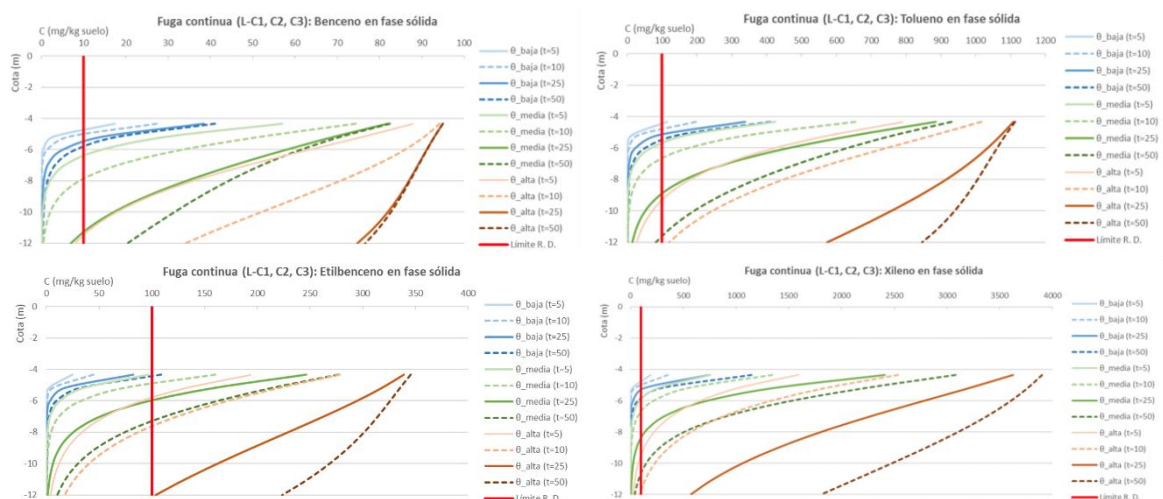


Figura 2. Fuga continua. Concentración de BTEX en fase sólida

En el caso del tolueno, los resultados son muy similares a los que presenta el benceno. Para θ baja, la contaminación se concentra en dos metros durante los primeros 50 años; para θ media la contaminación total del primer estrato se produce a los 50 años; en el caso más desfavorable, en el año 10 después de comenzar la fuga el primer estrato queda totalmente contaminado.

Representando las concentraciones del etilbenceno para θ baja, se observa que sólo se supera el límite del R. D. 9/2005 a los 50 años de inicio de la fuga y de forma muy leve. En el caso de θ intermedia, tras 50 años de simulación sólo se infringe el límite del R. D. 9/2005 en los primeros 4 metros bajo el tanque. Finalmente, en el año 25 de simulación queda contaminado todo el estrato de limos por etilbenceno con θ alta.

Las concentraciones en fase sólida del xileno se disparan junto al origen de la fuga de combustible. Sin embargo, los tiempos y las profundidades en las que se exceden los límites del R.D. 9/2005 son similares a benceno y tolueno. Con θ baja durante los primeros 50 años,

sólo en los 2 primeros metros bajo el tanque se exceden los límites del R. D. 9/2005. Para θ intermedia, tras 50 años de simulación queda contaminado el primer estrato hasta la cota -11 m aproximadamente. En el caso de θ alta, a partir del décimo año tras el inicio de la fuga continua, el primer estrato al completo incumple los requisitos del R.D. 9/2005.

La Figura 3 presenta las concentraciones de benceno en fase líquida para una fuga continua. La línea vertical roja corresponde con la máxima concentración de benceno en el agua admisible para el consumo humano según la EPA. Se comprueba que, en los distintos escenarios con diferentes humedades y conductividades, las concentraciones de benceno en la fase líquida superan ampliamente los estándares de la EPA.

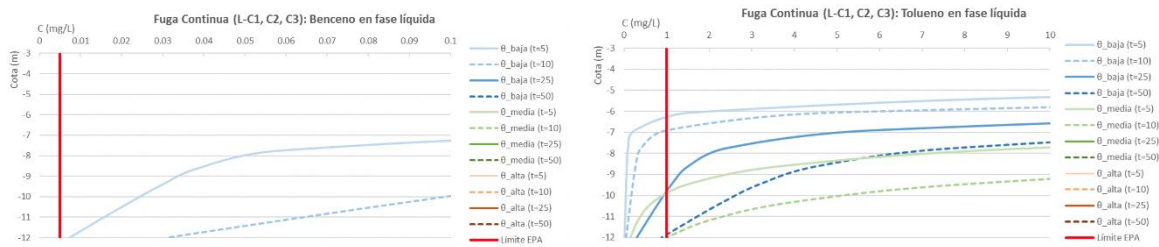


Figura 3. Fuga continua. Concentración de benceno y tolueno en fase líquida

Para el tolueno, las concentraciones en fase líquida no son superiores a los estándares de la EPA en todo el perfil hasta el año 50 de simulación para θ baja. Si las condiciones son normales (θ media), a partir del décimo año tras iniciarse la fuga, las concentraciones en fase líquida en el primer estrato exceden los límites de la EPA. En el caso de θ alta, toda la fase líquida del estrato superficial se contamina inmediatamente (en menos de 5 años). Los resultados para etilbenceno y xileno son muy similares a los del tolueno, aumentando ligeramente el tiempo necesario para contaminar todo el estrato.

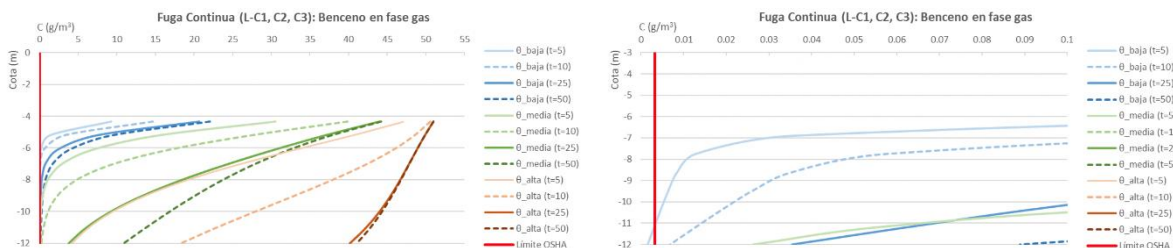


Figura 4. Fuga continua. Concentración de benceno y tolueno en fase gaseosa

La Figura 4 muestra las concentraciones en fase gas de benceno en el primer estrato. En ella observamos que, a excepción del caso con θ baja en los primeros años, en el resto de escenarios y tiempos representados las concentraciones son muy superiores a los límites recomendados por la Occupational Safety and Health Administration (OSHA) estadounidense (línea roja). Este fenómeno se repite en el resto de compuestos del BTEX.

La Figura 5 muestra la masa de BTEX que alcanza al acuífero cada año. Cuando el nivel freático está en su posición media (figura 5 izquierda), éste se sitúa en el tercer estrato comenzando desde la superficie. Por tanto, la gasolina que se vierte tiene que atravesar los estratos de limos y gravas completos y gran parte del estrato de arcillas, caracterizándose este último por tener una conductividad muy reducida y, por ello, la masa de contaminante que llega al acuífero es prácticamente nula.

Considerando un nivel freático extraordinario, elevándose 11 metros por encima de lo normal, y posicionándose en el límite entre gravas y arcillas (figura 5 derecha), la afección al acuífero es mucho mayor. Las conductividades hidráulicas equivalentes son más elevadas y los contaminantes tienen que atravesar menos terreno hasta llegar al acuífero. El transporte por advección predomina sobre la difusión en condiciones de θ media y alta.

Pasados entre 5-10 años tras iniciarse la fuga de combustible, los niveles de tolueno en el acuífero exceden los estándares máximos que establece la EPA. Al pasar 50 años, pueden llegar al acuífero hasta 40 kg anuales de tolueno, estimándose en unos 5 kg anuales en condiciones normales.

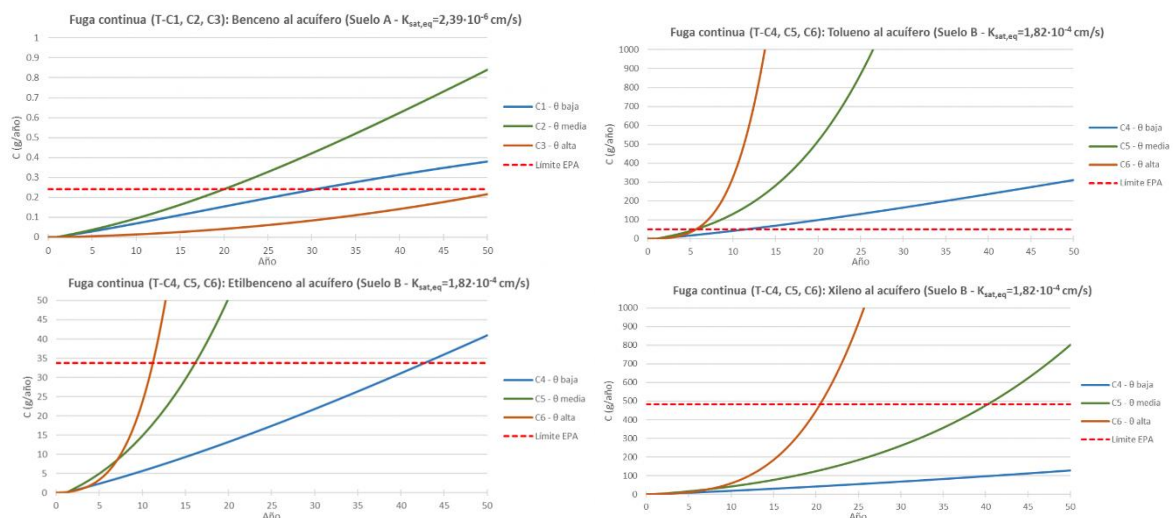


Figura 5. Fuga continua. Masa de BTEX transferidas al acuífero para distintos niveles freáticos

El impacto del etilbenceno al acuífero es más moderado que en benceno y tolueno. Dependiendo de las condiciones de humedad y conductividad hidráulica, el acuífero pasa a considerarse contaminado por etilbenceno en periodos distantes. Para θ baja, media y alta se supera el límite transcurridos a los 40, 15 y 10 años respectivamente. En condiciones normales, tras 50 años se registraría una entrada de 0,5 kg anuales de etilbenceno al acuífero, mientras que para las condiciones más desfavorables rondarían los 4 kg anuales.

Para que los niveles de xileno en el acuífero superen los límites que establece la EPA debe transcurrir más tiempo que en el resto de contaminantes. Así, para θ media y alta se supera el límite transcurridos 40 y 20 años respectivamente. Para humedad baja no se llegan a superar estos límites en los primeros 50 años. En las condiciones más desfavorables podrían llegar al acuífero más de 8 kg anuales de xileno.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido financiado parcialmente por el Ministerio de Economía y Competitividad a través del proyecto ¿QUIÉN HA SIDO? – Ref: CGL2014-59841-P

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BANERJEE, S.; YALKOWSKY, S. H. & VALVANI, C. (1980). *Water solubility and octanol/water partition coefficients of organics. Limitations of the solubility-partition coefficient correlation*. Environmental Science & Technology.
- BRUSSEAU, M. L., and RAO, P. S. C. (1989). *Sorption Nonideality During Organic Contaminant Transport in Porous Media*. CRC Critical Reviews in Environmental Control, 19:33-99.
- FETTER, C. W. (1999). *Contaminant Hydrogeology*. Prentice Hall.
- FETTER, C. W. (2001). *Applied Hydrogeology*. Prentice Hall.
- GHANBARIAN-ALAVIJEH, B. et al. (2010). *Estimation of the van Genuchten Soil Water Retention Properties from Soil Textural Data*. Soil Science Society of China.
- INSTITUTO GEOLÓGICO Y MINERO DE ESPAÑA (IGME). *Apoyo a la caracterización adicional de las masas de agua subterránea en riesgo de no cumplir los objetivos medioambientales en 2015. Demarcación Hidrográfica del Júcar. Plana de Valencia Norte*. <http://info.igme.es/SIDIMAGENES/139000/868/139868_0000012.PDF> [Consulta: 18/12/2017].
- INSTITUTO GEOLÓGICO Y MINERO DE ESPAÑA (IGME). *Sistema de información documental*. <<http://info.igme.es/ConsultaSID/index.asp>> [Consulta: 12/12/2017].
- KIM, S.; THIESSEN, P.A.; BOLTON, E.E.; CHEN, J.; FU, G.; GINDULYTE, A.; HAN, L.; HE, J.; HE, S.; SHOEMAKER, B.A.; WNAG, J.; YU, B.; ZHANG, J. & BRYANT, S.H. (2016) *PubchemSubstance and Compound databases*. Nucleic Acids Res.
- LYMAN, W. J.; REEHL, W. F. & ROSENBLATT D. H. (1990). *Handbook of chemical property estimation methods*. American Chemical Society.
- MILLINGTON, R. J. (1959). *Gas diffusion in porous media*. Science. 130:100-102.
- MINISTERIO DE AGRICULTURA, PESCA Y ALIMENTACIÓN. *De compuestos orgánicos volátiles*. <<http://www.mapama.gob.es/es/calidad-y-evaluacion-ambiental>> [Consulta: 02/06/2017].
- MINISTERIO DE AGRICULTURA, PESCA Y ALIMENTACIÓN. *Sistema de Información de Recursos Subterráneos*. <<https://sig.mapama.gob.es/redes-seguimiento/?herramienta=Sondeos>> [Consulta: 12/12/2017].
- PUBCHEM < <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>> [Consulta: 16/05/2018].
- RAVI, V. & JOHNSON, J. A. (1997). *VLEACH. A One-Dimensional Finite Difference Vadose Zone Leaching Model. Version 2.2*. U. S. Environmental Protection Agency. Version 2.2
- SCHWARZENBACH, R. P.; GSCHWEND, P. M. & IMBODEN D. M. (1993). *Environmental Organic Chemistry*. Wiley.
- VAN GENUCHTEN, M. TH. (1980). *A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils*. Soil Science Society of America Journal.