

DETERMINACIÓN CUANTITATIVA DEL RIESGO QUÍMICO-QCRA

Dr. Fernando Valero

MSc. Emilia Ingrid Vahl

Departamento I+D+i y control de procesos

Càtedra ATL de l'aigua potable

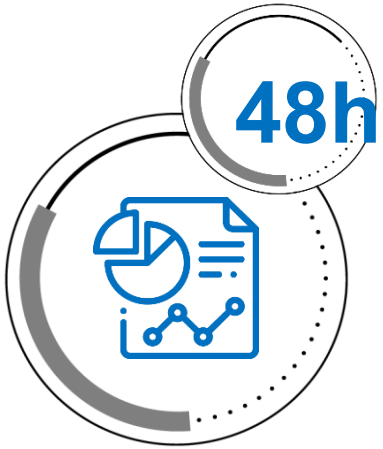
ATL Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat

Generalitat de Catalunya

Análisis de calidad del agua de consumo



El agua de consumo se suministra en contínuo



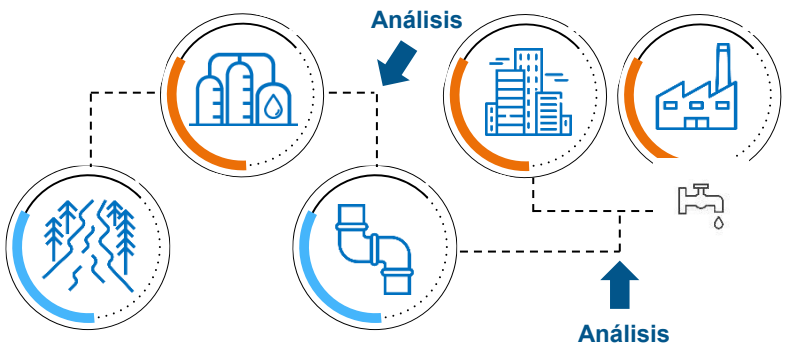
Los **resultados** de algunos parámetros no estan disponibles hasta al menos 48 tras la toma de muestras



Los **datos analíticos** de control corresponden mayoritariamente a **agua ya distribuida**.

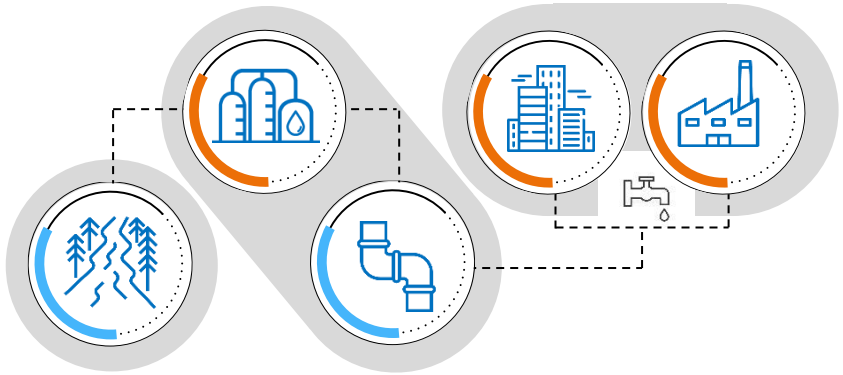
Análisis de calidad del agua de consumo

Control clásico (retrospectivo)



- **Análisis puntuales: salida** ETAP/EDAM, **red**
- **Cumplimiento parámetros legislados**
- Resultados analíticos **retrospectivos**
- **Control de calidad del producto**

Sistema preventivo de control



- **Evolución y gestión global del riesgo sanitario** (Recurso, Tratamiento, Distribución)
- **Cumplimiento RD 3/2023**
- **Gestión preventiva** de la calidad del agua
- **Control de calidad del proceso**

Plan Sanitario del Agua

Un **Plan Sanitario del Agua (PSA)** es una metodología de trabajo que consiste en **evaluar, priorizar y gestionar el riesgo** en un abastecimiento.

La **evaluación del riesgo** se define como la caracterización cualitativa o cuantitativa y la estimación de los posibles efectos adversos para la salud asociados con la exposición de individuos o poblaciones a peligros (compuestos químicos o agentes microbianos).

Los **objetivos** principales de un PSA:

1. identificación de los riesgos desde el recurso hídrico hasta el punto de entrega del agua de consumo humano al ciudadano,
2. la priorización de los riesgos que podamos encontrar y
3. la mitigación de dichos riesgos a través de medidas correctoras y medidas preventivas eficaces y adecuadas.

WSP	PSA	UNE-EN15975-2	ISO22000

Evaluación del riesgo

RD 3/2023

ANEXO VII

4. Evaluación de los riesgos

En el PSA básico se aplica un ***método semicuantitativo***, por lo que se va a valorar la gravedad del peligro y la probabilidad de que ocurra el **evento peligroso** si no se tomaran medidas correctoras o preventivas.

El operador podrá opcionalmente ampliar la evaluación de riesgos mediante la aplicación de un ***método cuantitativo***.

OMS

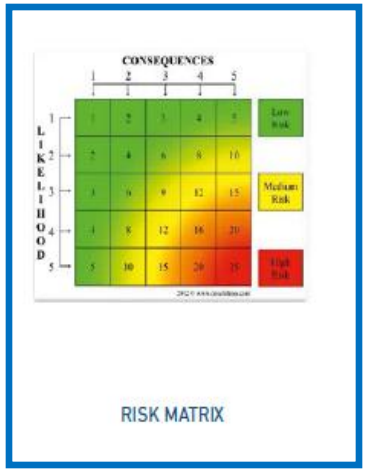
CATEGORIZACIÓN INFORMACIÓN DATOS EXPERIENCIA

EXPRESIÓN NUMÉRICA DATOS EXPERIENCIA

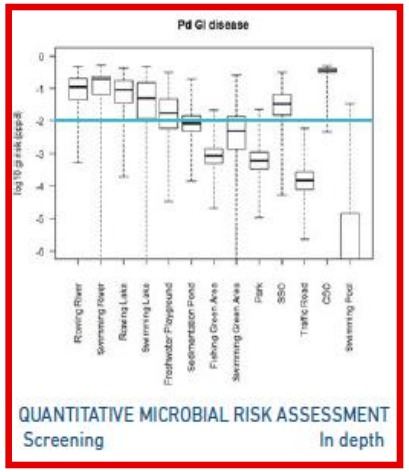
DATOS ESPECÍFICOS MODELOS MATEMÁTICOS



SANITARY INSPECTION



RISK MATRIX



QUANTITATIVE MICROBIAL RISK ASSESSMENT
Screening In depth

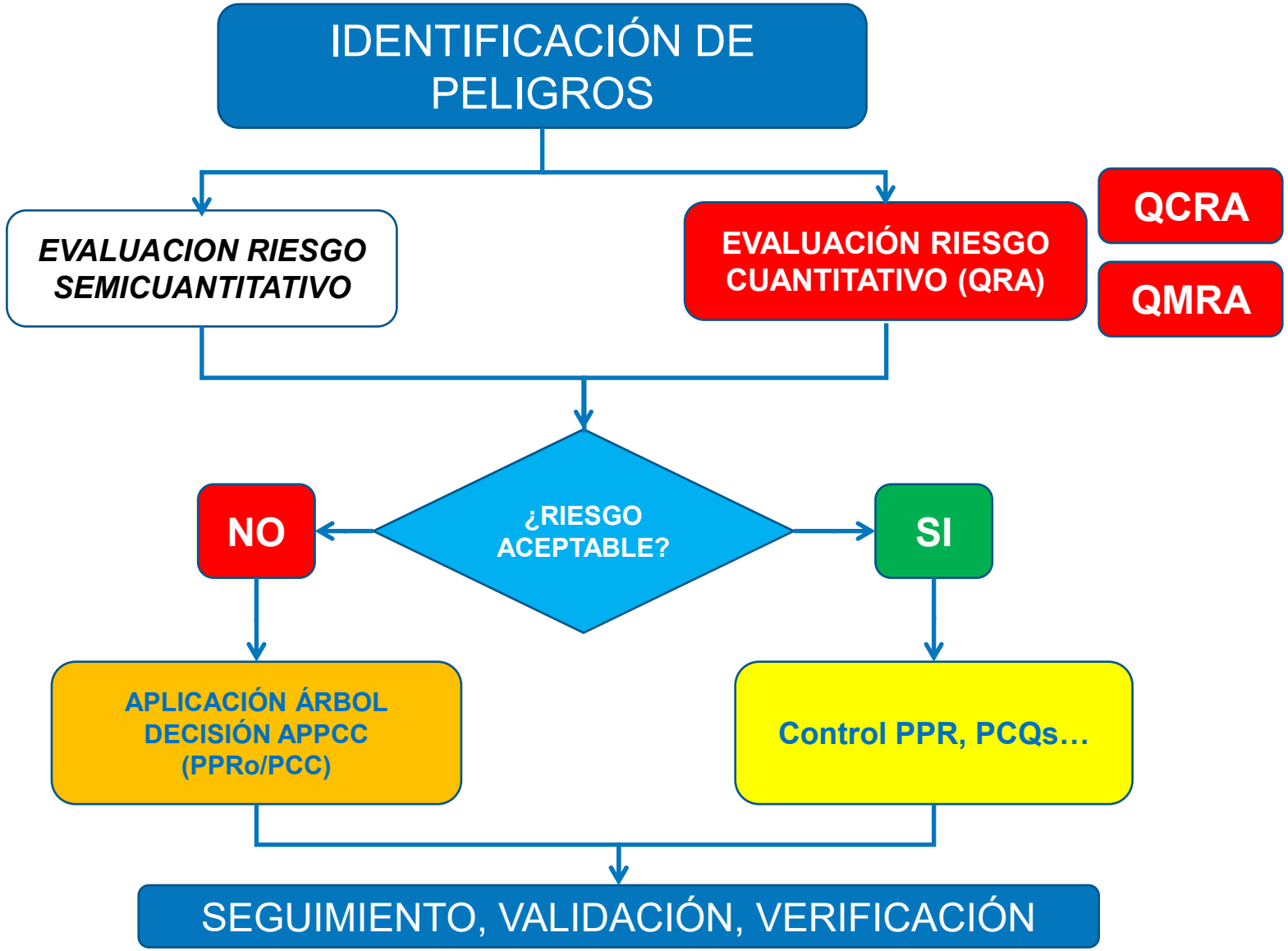


Evaluación del riesgo

Identificación

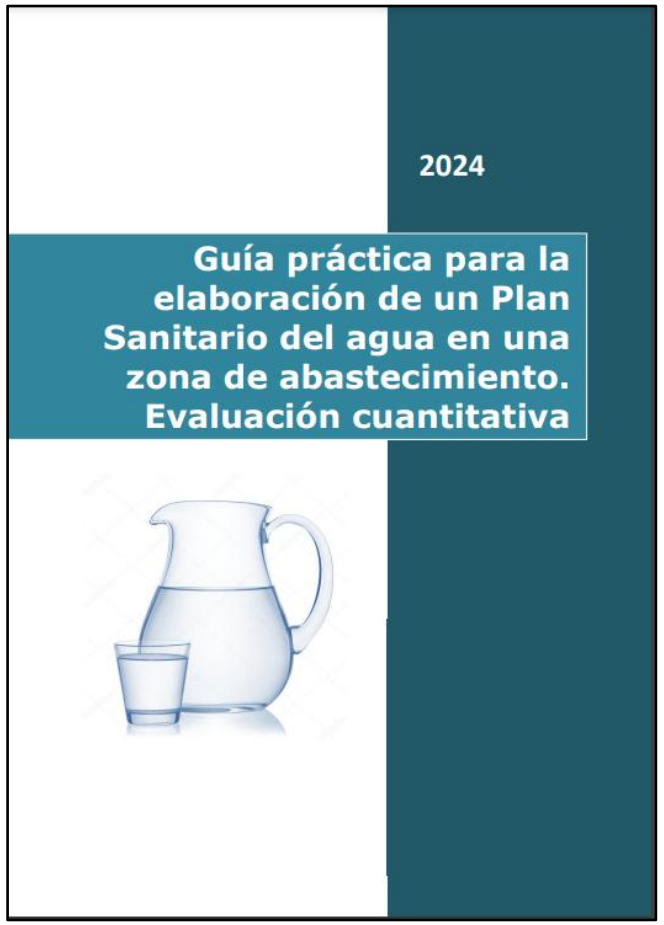
Evaluación

Gestión

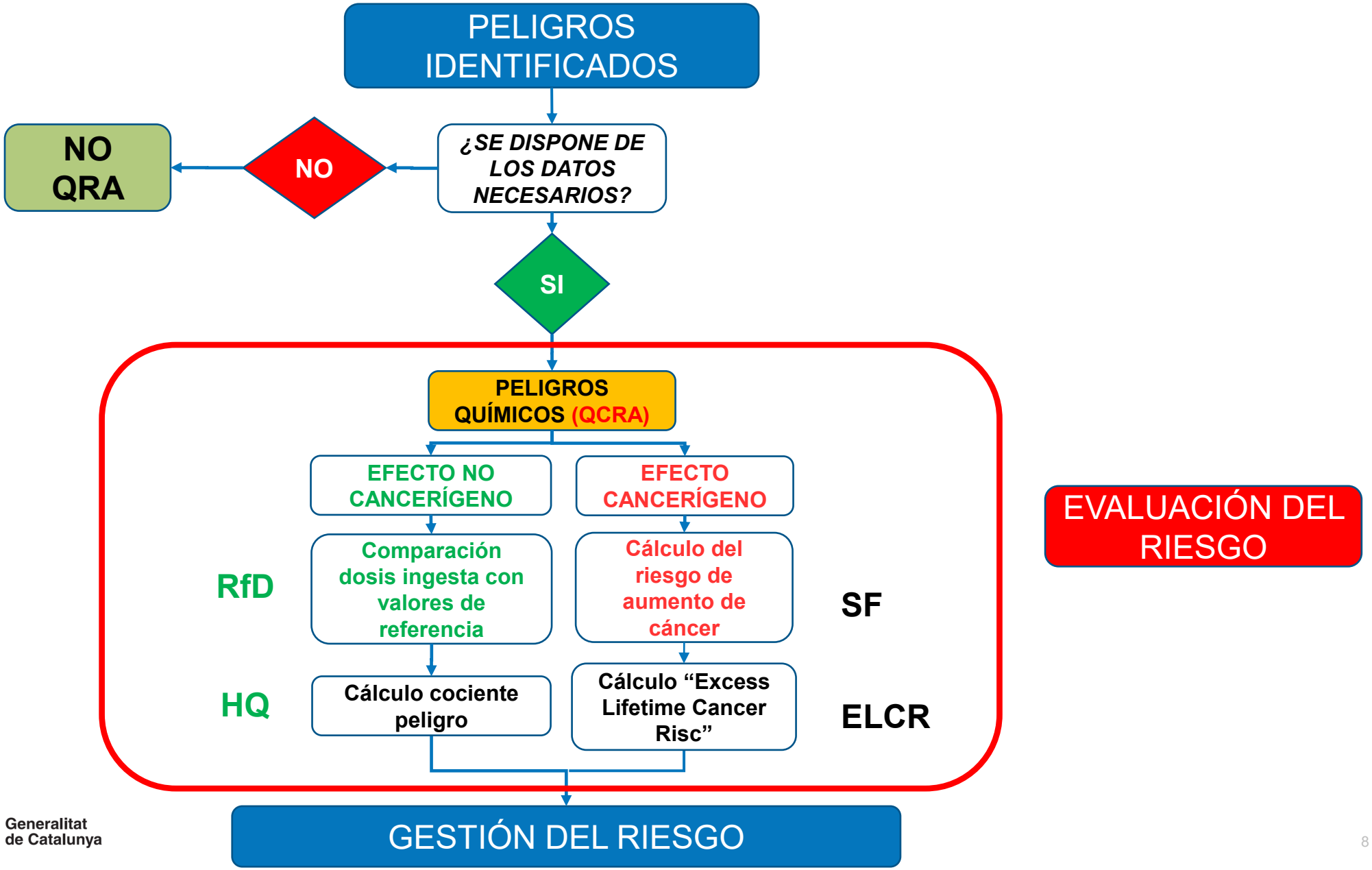


Evaluación del riesgo cuantitativo

La utilización de **metodologías de evaluación del riesgo cuantitativo** (**QMRA: microbiológico y QCRA: químico**), representa una metodología más objetiva, sistemática y real del riesgo de un determinado peligro, siendo especialmente útil para considerar y comparar las opciones que se presentan y tomar las medidas de control más eficientes para garantizar la inocuidad del producto elaborado.



Evaluación cuantitativa del riesgo químico (QCRA)



¿Por qué hacer un QCRA?

Un QCRA permite:

- Evaluar la toxicidad de compuestos legislados (con VP)
- Evaluar la toxicidad de compuestos no legislados (sin VP)
- Valorar el efecto aditivo que supone la presencia de diferentes compuestos químicos (con y sin VP)
- Determinar la evolución de la toxicidad a lo largo del tratamiento
- Dirigir el consumo a poblaciones específicas en función de su características, de la concentración de un determinado compuesto y de su toxicidad
- Diseñar el proceso de tratamiento en función de la presencia de determinados compuestos tóxicos

Ej: legislación. Parámetros sumatorios

RD 3/2023

37	∑4 Trihalometanos (THM).	100	µg/L

VP de la suma

Sin VP individual ¿toxicidad?

Parámetro sumatorio tras la determinación de 4 sustancias:
- Bromodiclorometano CAS 75-27-4
- Bromoformo CAS 75-25-2
- Cloroformo CAS 67-66-3
- Dibromoclorometano CAS 124-48-1

El operador se esforzará en obtener un valor lo más bajo posible, sin comprometer en ningún momento la desinfección

32	∑5 Ácidos Haloacéticos (HAH).	60	µg/L

VP de la suma

Sin VP individual ¿toxicidad)

Se controlará cuando el método de desinfección sea con productos en los que se libere o genere cloro activo.
Parámetro sumatorio tras la determinación de 5 sustancias:
- Ácido monocloroacético CAS 79-11-8
- Ácido dicloroacético CAS 79-43-6
- Ácido tricloroacético CAS 76-03-9
- Ácido monobromoacético CAS 79-08-3
- Ácido dibromoacético CAS 631-64-1

El operador se esforzará en obtener un valor lo más bajo posible, sin comprometer en ningún momento la desinfección.

Legislación vs Toxicidad

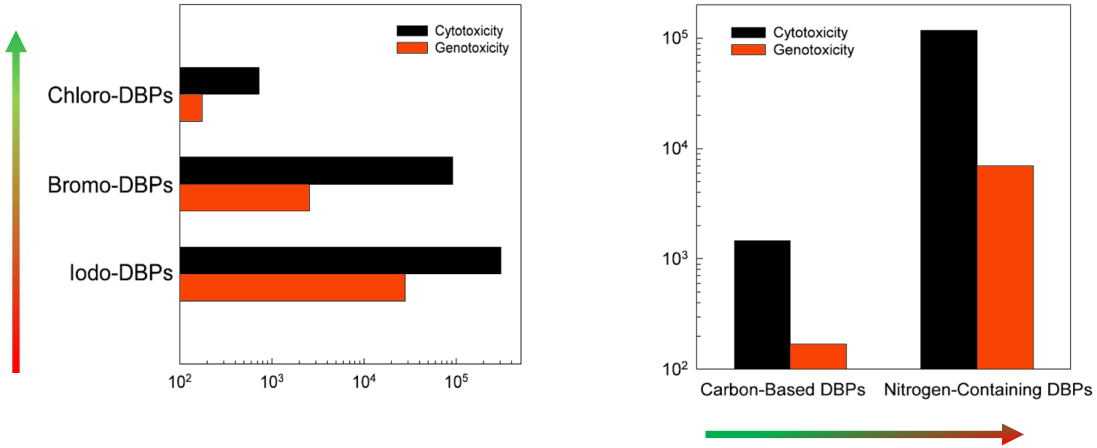
			VALORES PARAMÉTRICOS				VALOR GUIA	Oral Chronic Reference Dose (RfDoc) mg/kg-day	Oral Slope Factor (CSFo) kg·day/mg	IARC (1999)
		unidades	UE 2020	US 2024	Australia 2011	Canada 2025	OMS 2022	Risk Assessment Information System (2024)		
THMs	THM4	µg/L	100	80	250	100	-	-	-	-
	Chloroformo (TCM)	µg/L	-	-	-	-	300	1,00E-02	3,10E-02	2B
	Bromoformo (TBM)	µg/L	-	-	-	-	100	2,00E-02	7,90E-03	2B
	Dibromochlorometano (DBCM)	µg/L	-	-	-	-	100	2,00E-02	8,40E-02	3
	Bromodichlorometano (BDCM)	µg/L	-	-	-	-	60	8,00E-03	6,20E-02	3
AHAs	TAHA6					Draft 2026	-	-	-	-
	TAHA5	µg/L	60	60	-	-	-	-	-	-
	Chloroacetic acid	µg/L	-	-	150	-	-	-	-	-
	Dichloroacetic acid (DCAA)	µg/L	-	-	100	-	-	4,00E-03	5,00E-02	2B
	Trichloroacetic acid (TCAA)	µg/L	-	-	100	-	-	2,00E-02	7,00E-02	-
	MCAA	µg/L	-	-	-	-	-	3,50E-03	2.0·10-2	-
	MBAA	µg/L	-	-	-	-	-	1,70E-04	-	-
	DBAA	µg/L	-	-	-	-	-	3,00E-04	2,50E-01	-

Legislación vs Toxicidad

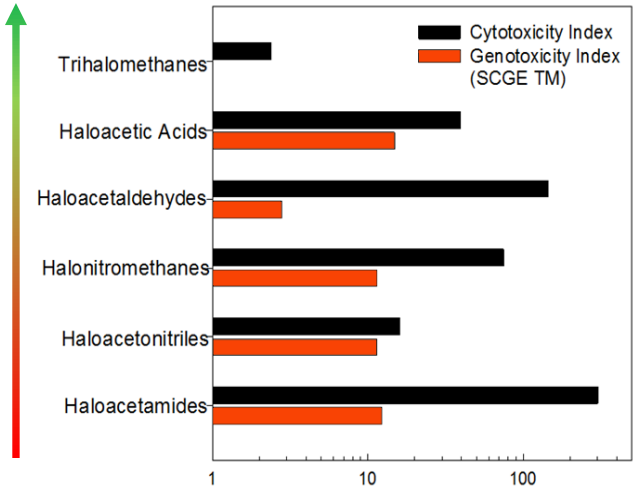
TABLE 1 DBPs evaluated for carcinogenicity in rodents

DBP	Result[a]
Trihalomethanes	
Bromodichloromethane	+
Bromoform	+
Chlorodibromomethane	+
Chloroform	+
Haloacetic acids	
Chloroacetic acid	–
Bromoacetic acid	+
Dibromoacetic acid	+
Bromodichloroacetic acid	+
Bromochloroacetic acid	+
Dichloroacetic acid	+
Dibromochloroacetic acid	+
Trichloroacetic acid	+

A review on the 40th anniversary of the first regulation of drinking water disinfection by-products. David M. DeMarini Environ Mol Mutagen. **2020**;61:588–601.



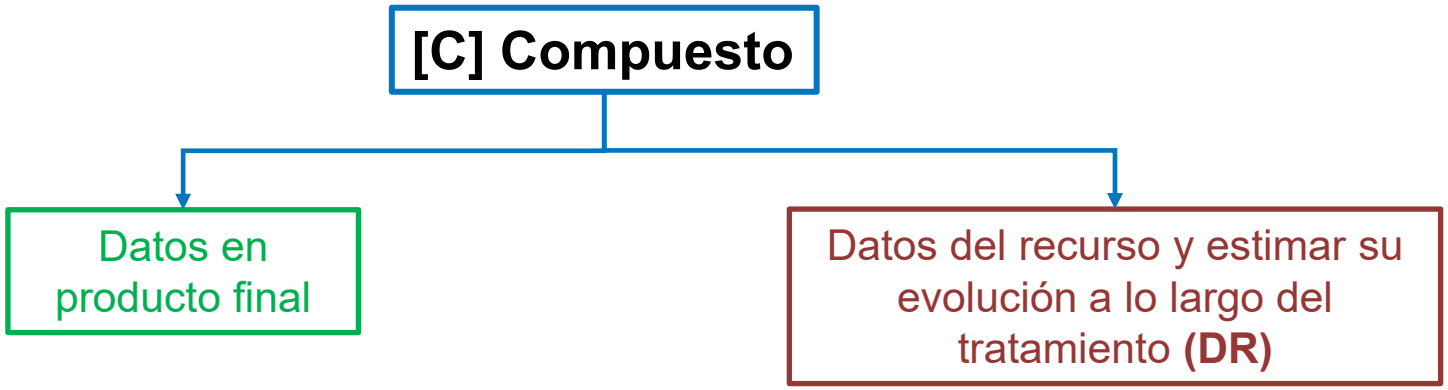
Plewa MJ et al. In Disinfection by-products in drinking water. ACS symposium Series, 995, ***2008:*** *36-50.*



Jeong CH et al. Environ. Sci. Technol. 49 ***(2015)*** *13749-13759*

En general, los SPD bromados son más carcinogénicos que los clorados (Richardson et al., ***2007).***

QCRA. Metodología.



- Debe escogerse un **período de datos representativo**, lo más amplio posible que refleje la calidad del agua producida mediante el tratamiento actual.

- Cuando se hayan incluido **etapas de mejora** que afecten específicamente al parámetro evaluado, se tomarán los datos recogidos con posterioridad, que se deben corresponder con **el período más actualizado.**

- Debe hacerse un **ajuste de la población**: **volumen (V)** de ingesta y **peso corporal (P)**

QCRA. Metodología.

Se pueden utilizar **dos modelos**:

- **aproximación puntual o determinista**, empleando datos puntuales (valor mínimo, máximo, medio,..)

- **aproximación estocástica o probabilística**, utilizando distribuciones de estos datos, generalmente mediante simulaciones con el modelo de Monte Carlo.

QCRA. Metodología puntual o determinista

Dosis diaria ingerida

CDI (Chronic Daily Intake): (mg/kg·dia).

- **C** = Concentración del contaminante (mg/L) **(min, medio, máx)**
- **P** = Peso corporal → peso corporal (kg)
- **V** = **Volumen** de agua ingerida al día (L/día)

En agua potable

$$CDI = \frac{C \times V \times F}{P}$$

- **F** = Factor de **exposición** $F = \frac{EF \times ED}{AT}$

Siendo:
EF = Frecuencia de exposición → días/semana o semanas /año
ED = Duración de la exposición → años de exposición
AT = Tiempo de promedio (en cáncer = 78 años)

Permite aproximaciones poblacionales, para grupos determinados: niños, ancianos, enfermos...ajustando el peso y el volumen de agua ingerido:

Adulto medio: Peso 70Kg, Ingesta 2L/día (OMS)

A partir del agua captada

$$CDI = \frac{\left(C - \left(C \times \frac{DR}{100}\right)\right) \times V \times F}{P}$$

- **DR**= porcentaje de reducción a lo largo del tratamiento (0 en producto final)

QCRA. Metodología puntual. No cancerígenos

Dosis de referencia

RfD. Es la dosis máxima diaria de una sustancia a la que una persona puede estar expuesta durante toda la vida sin esperar efectos adversos.

Se expresa en mg/kg/día.

Ej: THMs

Reference Doses (RfD) (mg/kg/day).
Oral Contact:

- CF: 0.01
- BDCM, DBCM, BF: 0.02

Ej: AHAs

Reference Doses (RfD) (mg/kg/day)	
Dibromoacetic Acid (DBAA)	0.0003
Dichloroacetic Acid (DCAA)	0.004
Monobromoacetic Acid (MBAA)	0.0017
Monochloroacetic Acid (MCAA)	0.0035
Trichloroacetic Acid (TCAA)	0.02

BBDD IRIS (USEPA)

QCRA. Metodología puntual. No cancerígenos

Cociente de peligro

HQ (Hazard Quotient): Indica si la exposición a una sustancia es segura en relación con efectos NO cancerígenos.

$$HQ = \frac{CDI}{RfD}$$

HQ < 1 → riesgo acceptable ✓

HQ > 1 → posible riesgo ✗

HI (Hazard Index): El Índice de Peligro es una medida integrada del riesgo no carcinogénico que permite evaluar el efecto combinado de varias sustancias presentes simultáneamente en el mismo escenario de exposición. El HI se calcula como la suma de los Cocientes de Riesgo (HQ) individuales y proporciona una estimación del riesgo agregado asociado a una mezcla de contaminantes.

$$HI = \sum_{i=1}^{n} \frac{CDI_i}{RfD_i} = \sum_{i=1}^{n} HQ_i$$

HI < 1 → riesgo acceptable ✓

HI > 1 → posible riesgo ✗

EJEMPLO

COMPUESTO	HQ
Boro	0,010
Bromoformo ($CHBr_3$)	0,001
Dibromclormetano ($CHBr_2Cl$)	0,100
Bromodiclormetano ($CHBrCl_2$)	0,210
Cloroformo ($CHCl_3$)	0,010
Nitrato	0,001
Terbutilazina	0,100
HI = ΣHQ	**0,432**

QCRA. Metodología puntual. Cancerígenos

Factor de pendiente carcinogénico

SF (Cancer Slope Factor): Es la **potencia cancerígena de un compuesto.** Indica cuánto aumenta el riesgo de cáncer por unidad de dosis ingerida (mg/kg·día) a lo largo de la vida.

Ej: THMs

Chemical	Cancer group	SF(mg/kg-day)$^{-1}$		
		Ingestion	Dermal contact[a]	Inhalation
Chloroform	B2	0.0061 (RAIS)	0.0061 (RAIS)	0.081 (RAIS)
BDCM	B2	0.062 (IRIS)	0.062 (IRIS)	0.13 (Cal/EPA)
DBCM	C	0.084 (IRIS)	0.084 (IRIS)	0.094 (Cal/EPA)
Bromofrom	B2	0.0079 (IRIS)	0.0079 (IRIS)	0.0039(RAIS)

Cal/EPA California Environmental Protection Agency (Cal/EPA 2010); *IRIS* Integrated Risk Information System (IRIS 2011); *RAIS* Risk Assessment Information System (RAIS 2010)

[a] Slope factors of ingestion route were used to calculate cancer risk of chloroform, BDCM, DBCM, and bromoform through dermal contact

BBDD IRIS (USEPA)

Riesgo de cáncer a lo largo de toda la vida

ELCR (Excess Lifetime Cancer Risk):

ELCR = CDI x SF

USEPA:

- **ELCR > 1 × 10^{-4},** es necesario reducir el riesgo, dado que puede incrementar la incidencia de casos de cáncer en la población.
- **1 × 10^{-6} < ELCR < 1 × 10^{-4},** se debe evaluar y estudiar la implementación de acciones correctoras u oportunidades de mejora, en función de los costes, la población expuesta y otras circunstancias de interés.
- **ELCR < 1 × 10^{-6}**, generalmente no se considera que exista un riesgo apreciable para la población.

QCRA. Metodología.

THM. Bromoformo



CHBr3

Nº CAS	75-25-2	PESO MOLECULAR	252,731 g/mol

EVALUACION DEL RIESGO SEMICUANTITATIVA - GRAVEDAD: MUY GRAVE

REPERCUSIÓN EN SALUD

CARCINOGENICIDAD

CATEGORIA	ORGANISMO	NOTAS
B2	USA -EPA	Según directrices U.S. EPA, 1986

MUTAGENICIDAD

CATEGORIA	ORGANISMO	NOTAS

TOXICIDAD A LA REPRODUCCIÓN

CATEGORIA	ORGANISMO	NOTAS

ALTERADOR ENDOCRINO

CATEGORIA	ORGANISMO	NOTAS

TOXICIDAD

AGUDO/CRÓNICO	ORGANISMO	NOTAS
Acute Tox.3 H331	UE – ECHA	(2009)

OTROS RIESGOS PARA LA SALUD / OBSERVACIONES

EVALUACION DE RIESGO CUANTITATIVA - FACTORES

RfD/IDT - DOSIS DE REFERENCIA/INGESTA DIARIA TOLERABLE

VALOR	ORGANISMO	NOTAS
0,02 mg/kg/día	USA – EPA IRIS USA –ATSDR OMS	(1987) (2005) (2005)

SF - FACTOR DE PENDIENTE ORAL

VALOR	ORGANISMO	NOTAS
0,0079 (mg/kg/día)$^{-1}$	USA – EPA IRIS	(1990)

OBSERVACIONES

VALOR EN AGUA DE CONSUMO

NACIONAL	2021			
ANEXO I. PARTE	QUIMICOS	Valor paramétrico		
NOTA	Ver ficha de Trihalometanos (THM)			

EUROPEA	2020.			
ANEXO I. PARTE B	QUIMICOS	Valor paramétrico		
NOTA	Ver ficha de Trihalometanos (THM)			

OMS	2022. Guías			
	QUIMICOS	Valor guía	100	µg/L
NOTA				

OTRAS INFORMACIONES DE INTERES

FUENTES DE CONTAMINACION

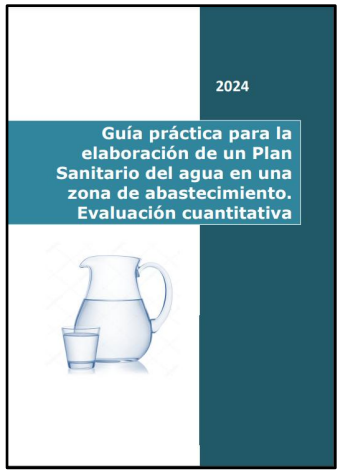
Subproductos de la desinfección con cloro

TRATAMIENTO PARA REDUCIR O ELIMINAR EL CONTAMINANTE

Minimizar la generación de subproductos mediante el uso de dióxido de cloro u ozono o
Adsorción con carbono activado (CAP y CAG), o
Stripping (Torres de aireación) + aireación, o
En depósitos: Sistemas de eliminación de THMS + aireación (TRS))

METODOS DE ANALISIS PRINCIPALES

GC/MS o GC-ECD



Un compuesto cancerígeno puede ser tóxico a concentraciones bajas sin llegar a ser cancerígeno [se calcula el HQ (NC) y el ELCR (C)]

QCRA. Metodología probabilística o estocástica

Simulación de Monte Carlo

- Las **concentraciones** del compuesto no son constantes a lo largo del tiempo.
- Los **datos históricos** muestran una alta **variabilidad** entre muestras, periodos del año y condiciones operativas del tratamiento que no se evalúan bien sólo con valores mínimos, promedio y máximos.
- De manera similar, los parámetros de **exposición humana** (consumo de agua, peso corporal, frecuencia de exposición) tampoco son idénticos para toda la población.

Principio de la metodología

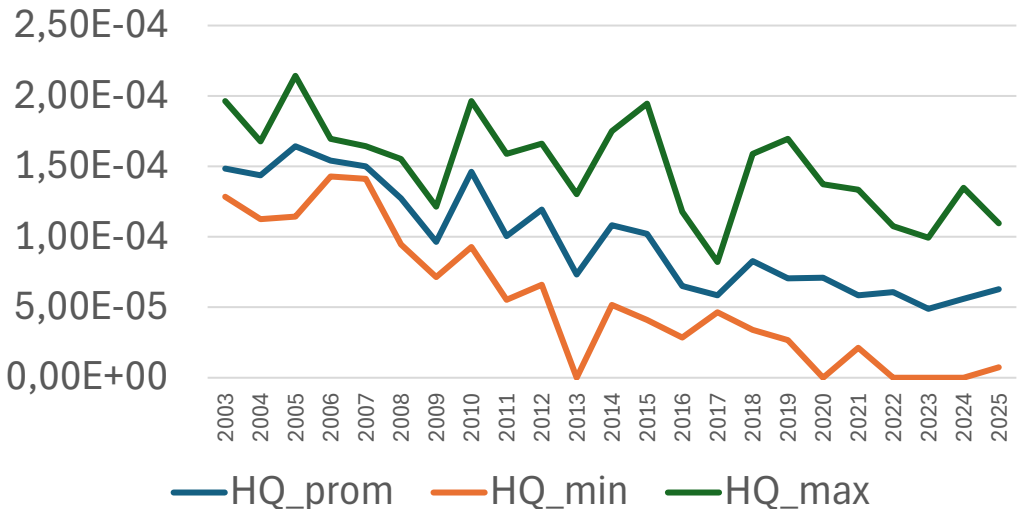
- Una simulación de Monte Carlo consiste en generar miles de posibles escenarios combinando aleatoriamente:
- Concentraciones observadas.
- Consumo de agua.
- Peso corporal.
- Parámetros de exposición.
- Para cada escenario, se calcula el riesgo correspondiente.

Miles de escenarios posibles → Distribución completa de riesgos → Estimación de probabilidad

Ej: Nitratos. Riesgo no cancerígeno. Salida planta 1

Cociente de peligro (HQ)

puntual

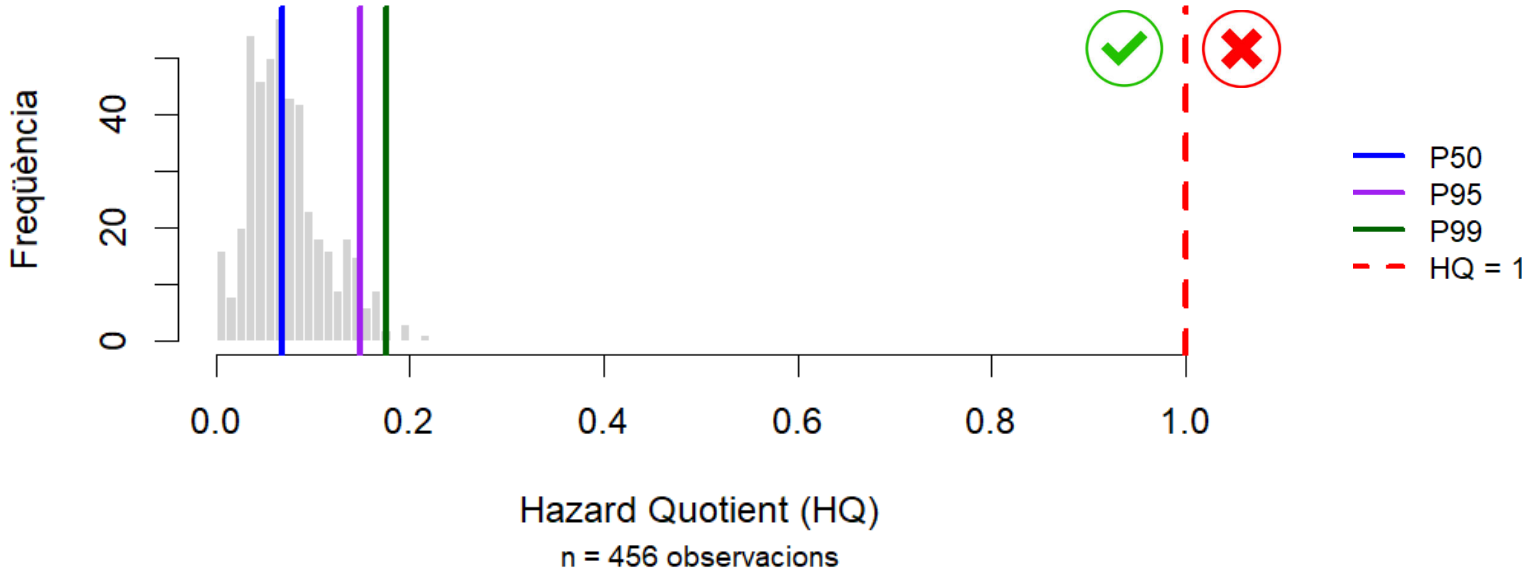


RfD: 1,6 mg/kg/día)

VP: 50 mg/L

n = 456

probabilística



Càtedra ATL de l'aigua potable

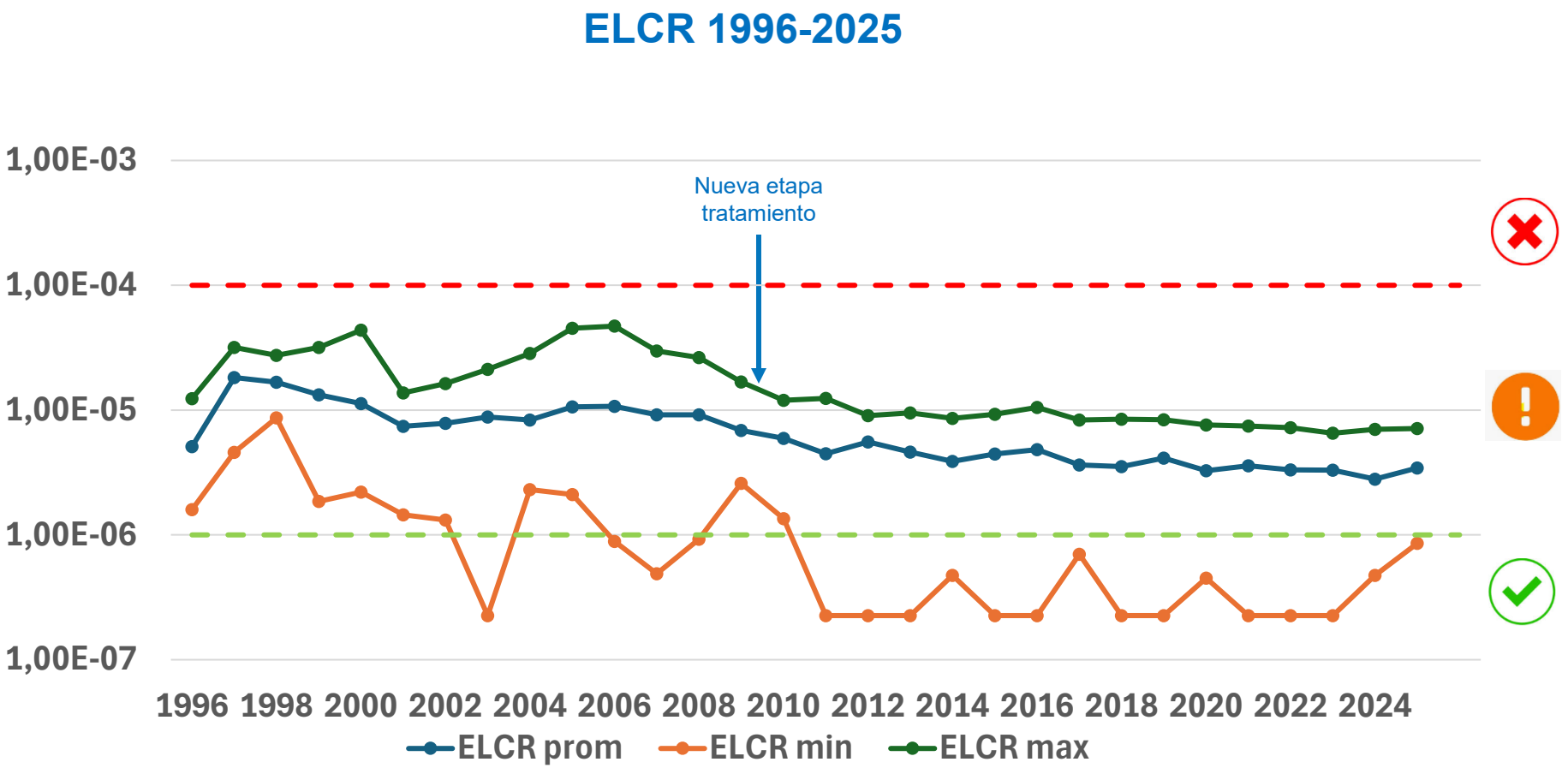
ATL Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat

Generalitat de Catalunya

Ej: Bromoformo ($CHBr_3$) Salida planta 1

SF: 0,0079 mg/L
RfD: 0,02 mg/kg/día)

Puntual cancerígeno

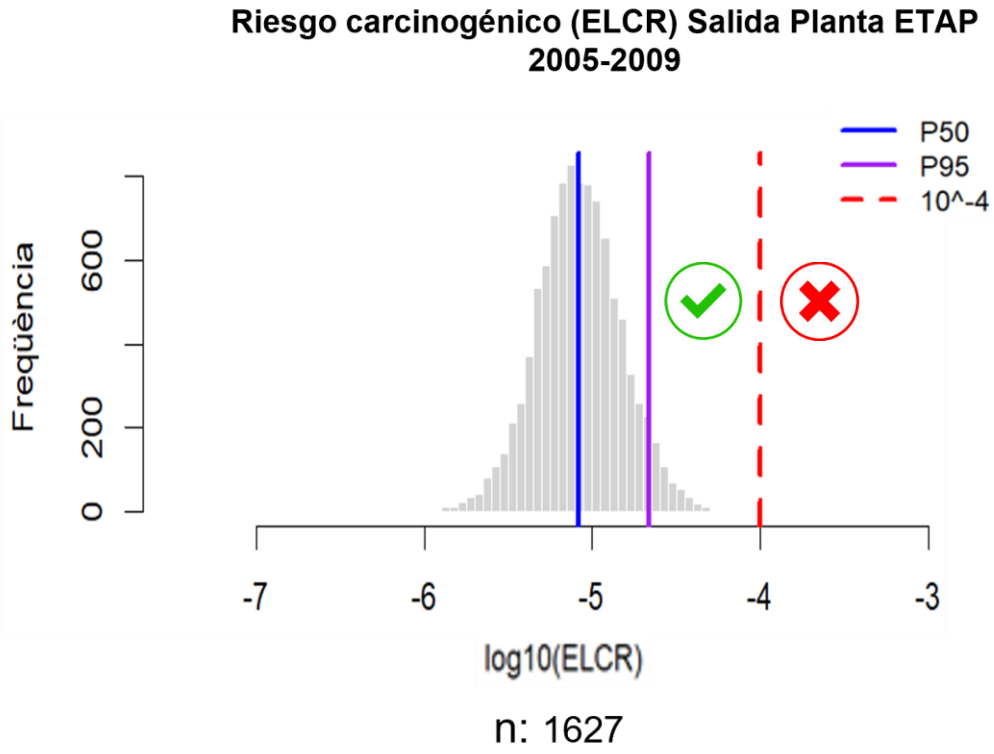


Ej: Bromoformo ($CHBr_3$) Salida planta 1

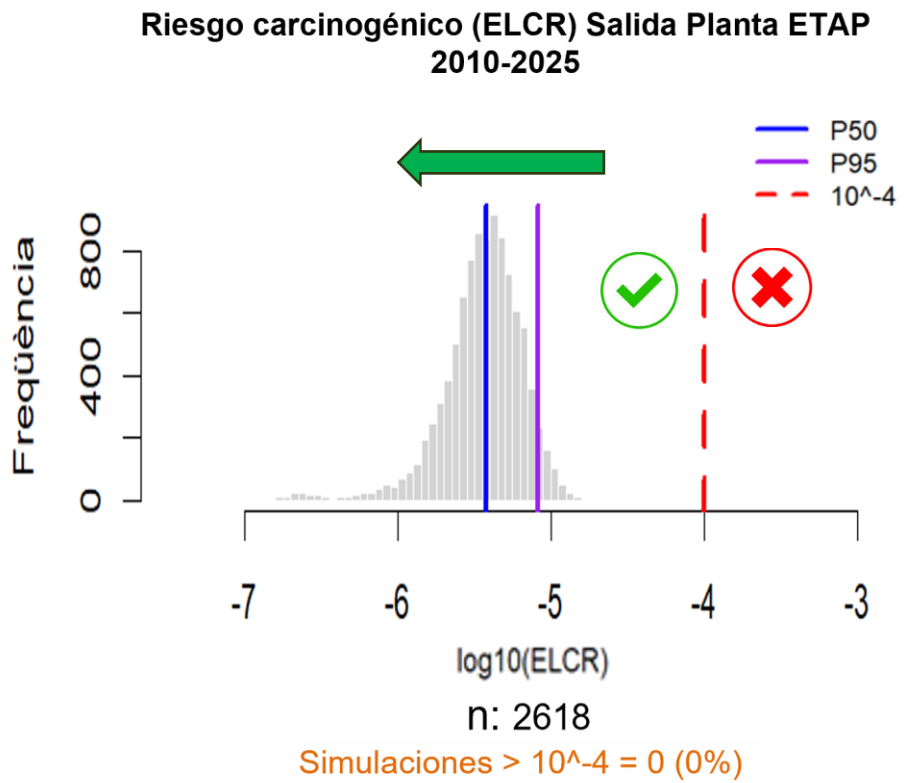
Probabilístico cancerígeno

SF: 0,0079 mg/L
RfD: 0,02 mg/kg/día)

10.000 iteraciones MC



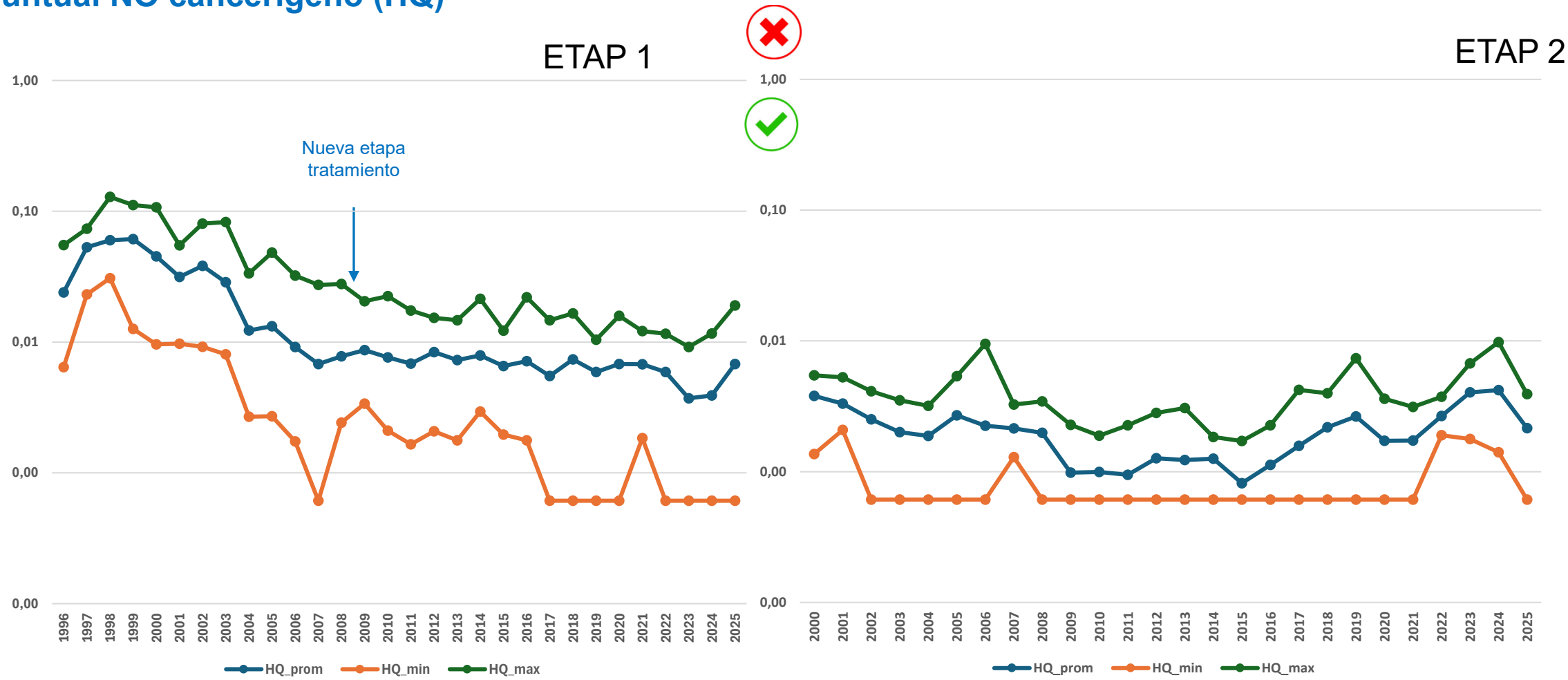
Nueva etapa de tratamiento



Ej: Dibromoclorometano ($CHBr_2Cl$) Salida planta 1/2

SF: 0,084mg/L
RfD: 0,02 mg/kg/día)

Puntual NO cancerígeno (HQ)



Cátedra ATL de l'aigua potable

ATL Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat

Generalitat de Catalunya

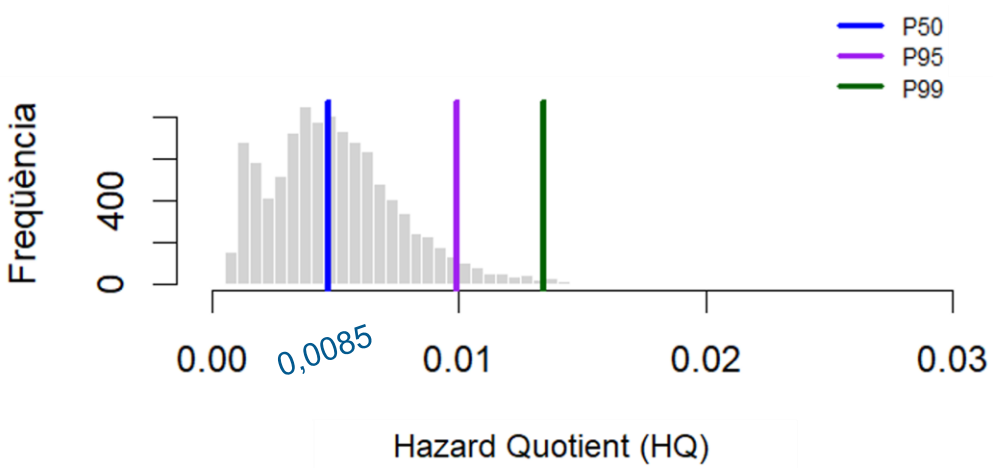
Ej: Dibromoclorometano ($CHBr_2Cl$) Salida planta 1

SF: 0,084mg/L
RfD: 0,02 mg/kg/día)

10.000 iteraciones MC

Probabilístico NO cancerígeno (HQ)

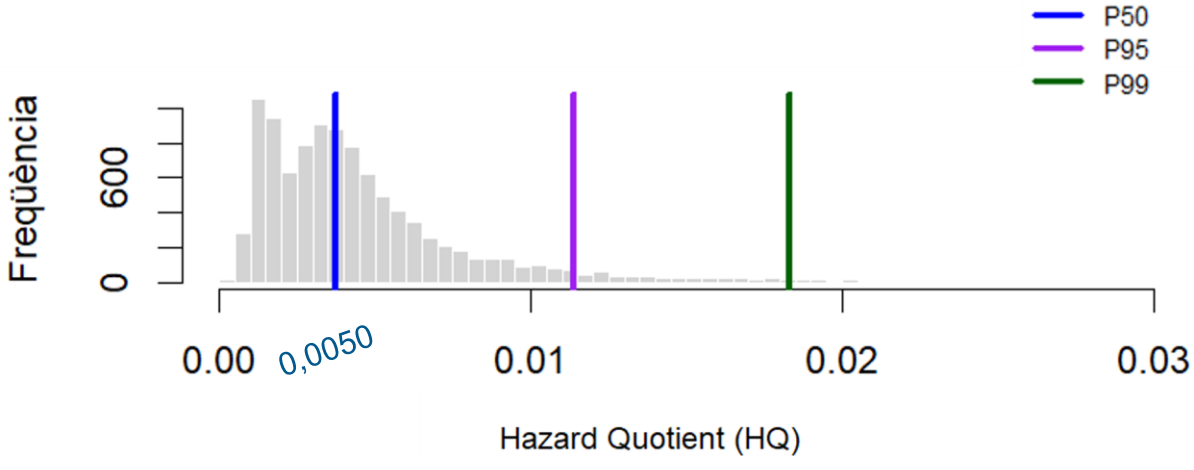
2005-2009



n observaciones históricas: **384**

Nueva etapa de tratamiento

2010-2025



n observaciones históricas: **826**

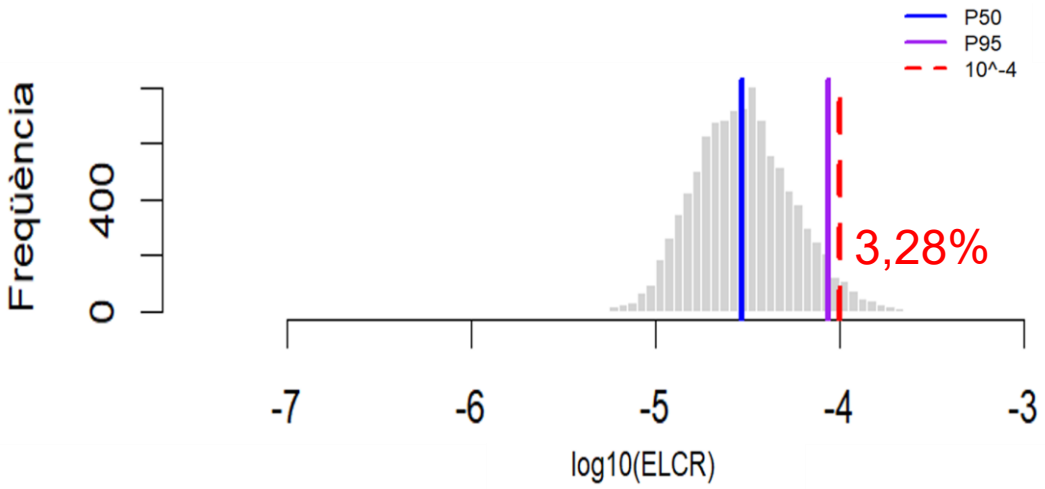
Ej: Dibromoclorometano ($CHBr_2Cl$) Salida planta 1

SF: 0,084mg/L
RfD: 0,02 mg/kg/día)

10.000 iteraciones MC

Probabilístico cancerígeno (ELCR)

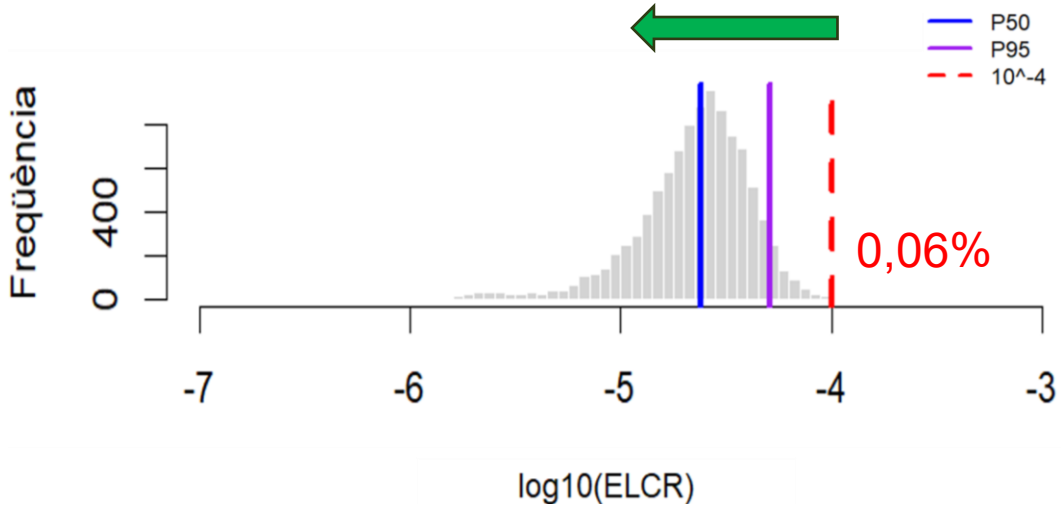
2005-2009



n observaciones históricas: **1627**

Nueva etapa de tratamiento

2010-2025



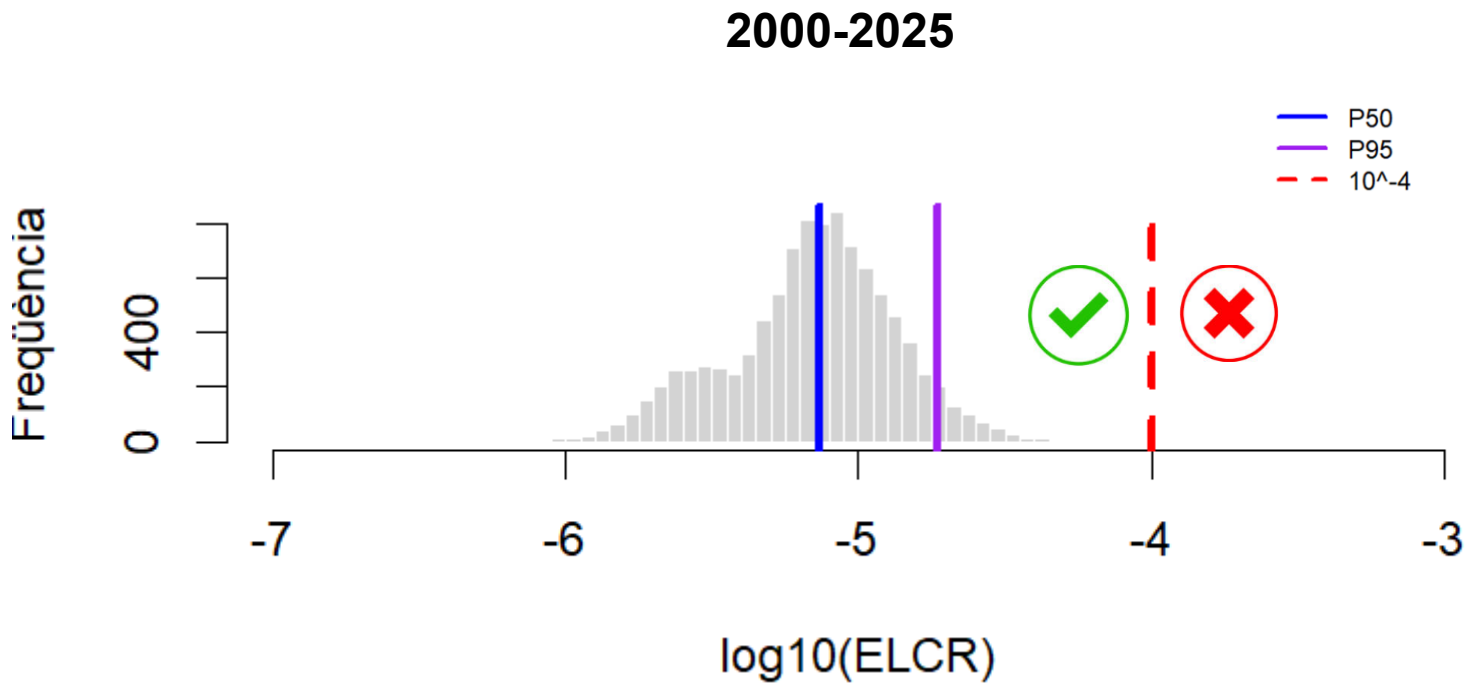
n observaciones históricas: **2618**

Ej: Dibromoclorometano ($CHBr_2Cl$) Salida planta 2

SF: 0,084mg/L
RfD: 0,02 mg/kg/día)

10.000 iteraciones MC

Probabilístico cancerígeno (ELCR)



n observaciones históricas: 1705

Ej: Dibromoclorometano ($CHBr_2Cl$)

SF: 0,084mg/L
RfD: 0,02 mg/kg/día)

Resumen resultados método probabilístico

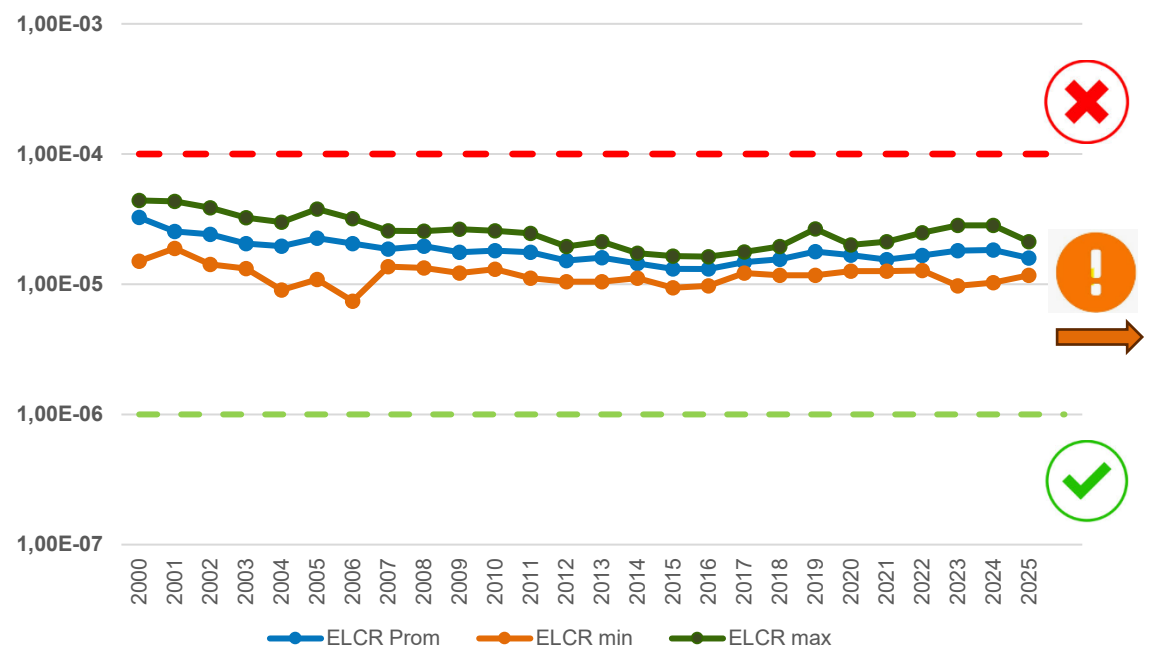
	Indicador	ETAP 1		ETAP 2
		2005-2009	2010-2025	2000-2025
No cancerígeno	P50 HQ	0,0085	0,0050	0,0044
	P95 HQ	0,0190	0,0109	0,0112
	P99 HQ	0,0266	0,0169	0,0188
	HQ > 1 (%)	**0**	**0**	**0**
Cancerígeno	P50 ELCR	$2,96 \cdot 10^{-5}$	$2,41 \cdot 10^{-5}$	$7,33 \cdot 10^{-6}$
	P95 ELCR	$8,63 \cdot 10^{-5}$	$5,12 \cdot 10^{-5}$	$1,88 \cdot 10^{-5}$
	P99 ELCR	$1,40 \cdot 10^{-4}$	$6,88 \cdot 10^{-5}$	$2,82 \cdot 10^{-5}$
	ELCR > 10^{-4} (%)	**3,28**	**0,06**	**0**

Ej. Bromodiclormetano ($CHBrCl_2$) Salida planta 2

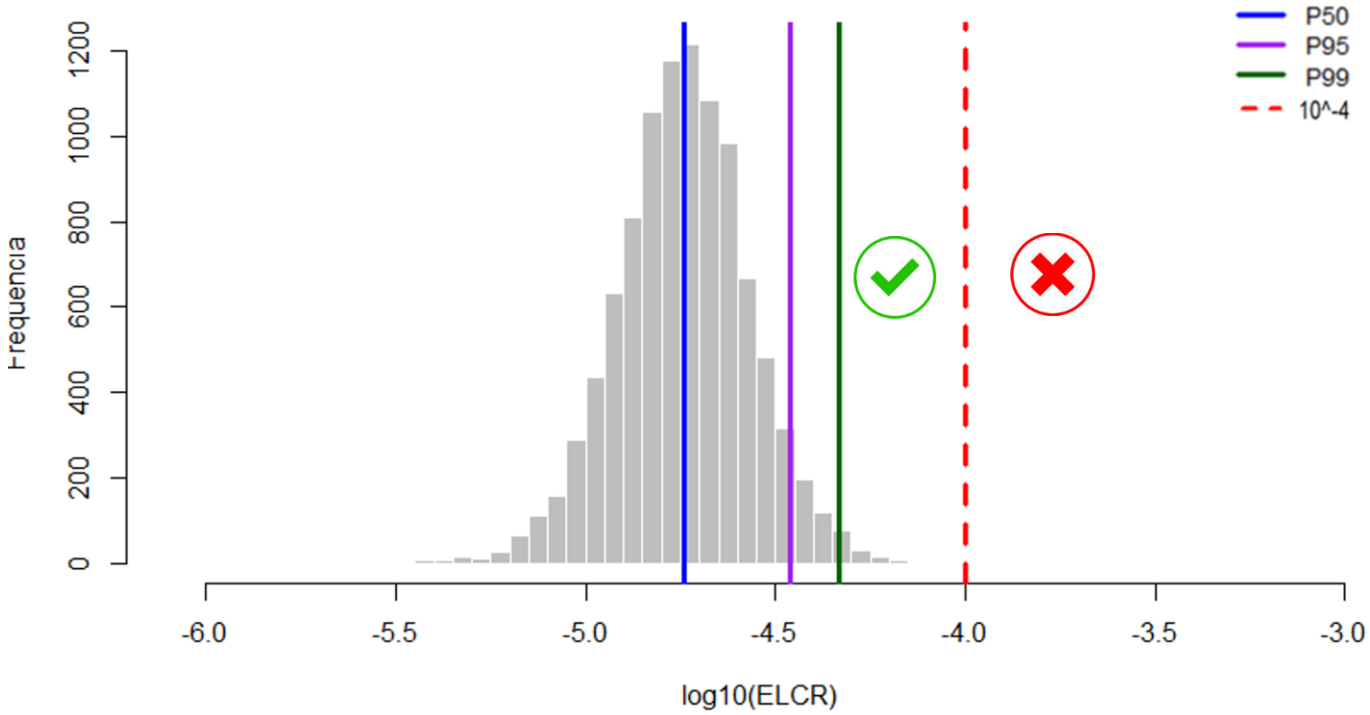
Cancerígeno (ELCR)

SF: 0,062 mg/L
Rfd: 0,02 mg/kg/día)

n = 1705
10.000 iteraciones MC



puntual



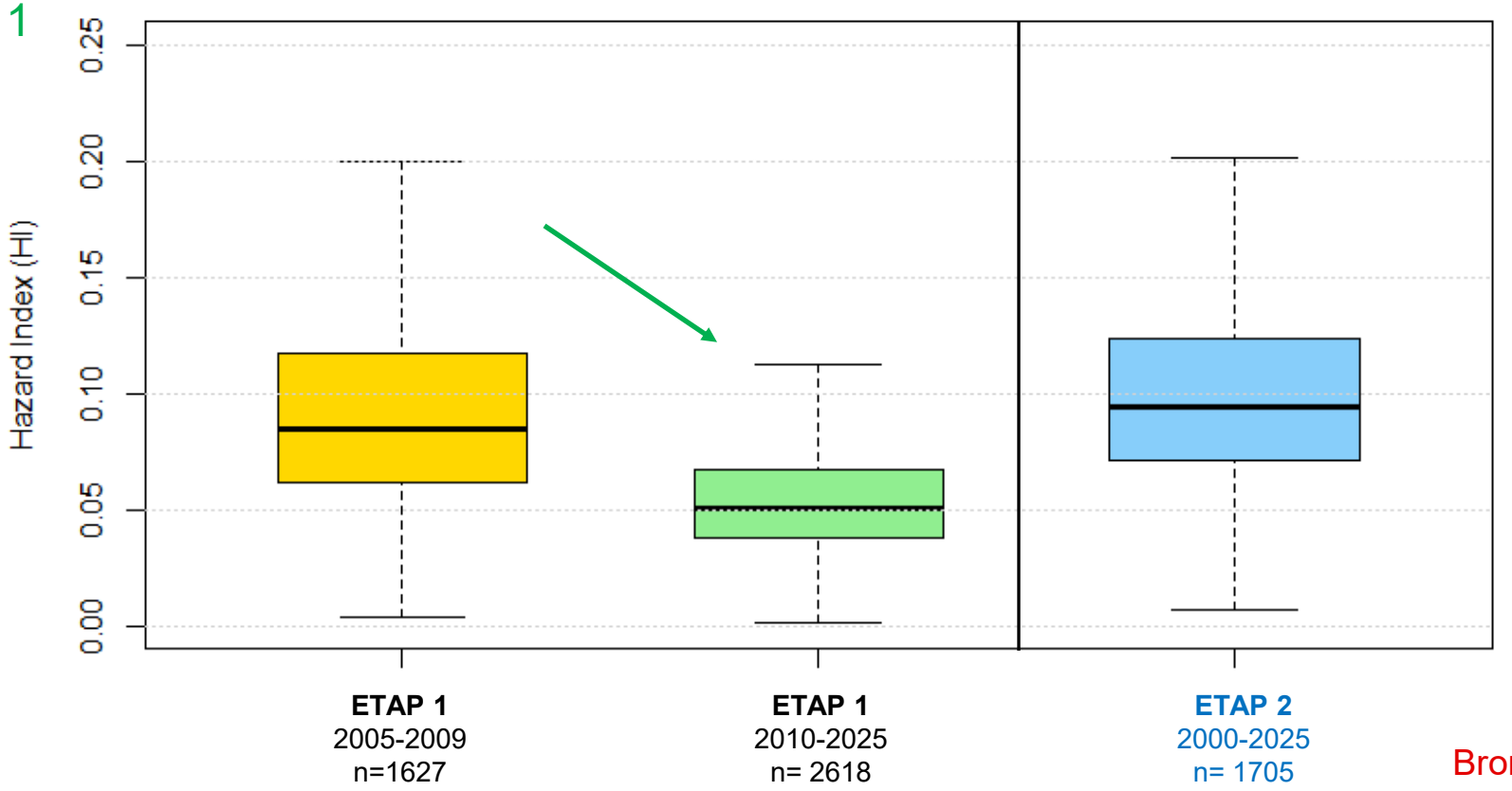
probabilístico

Ej: THMs totales.

Puntual NO cancerígeno (HQ)

$HI = \Sigma HQ_{4\ THMS}$

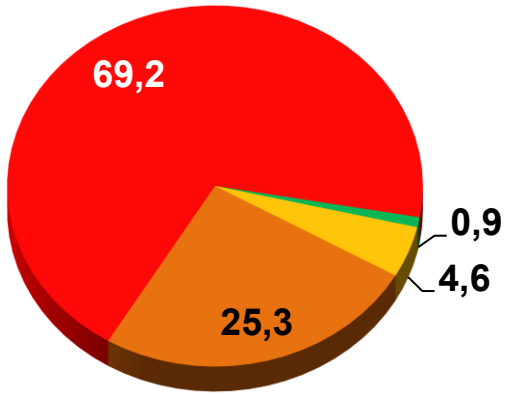
< 1



Bromoformo ($CHBr_3$)
Dibromclormetano ($CHBr_2Cl$)
Bromdiclormetano ($CHCl_2Br$)
Cloroformo ($CHCl_3$)

Ej. THMs. Diseño proceso basado en toxicidad

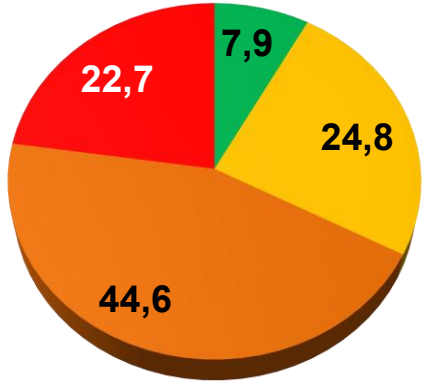
FILTRACIÓN CAG



% CHCl3 CHBrCl2 CHBr2Cl CHBr3

Nueva etapa de tratamiento específica

FILTRACIÓN CAG + EDR



% CHCl3 CHBrCl2 CHBr2Cl CHBr3

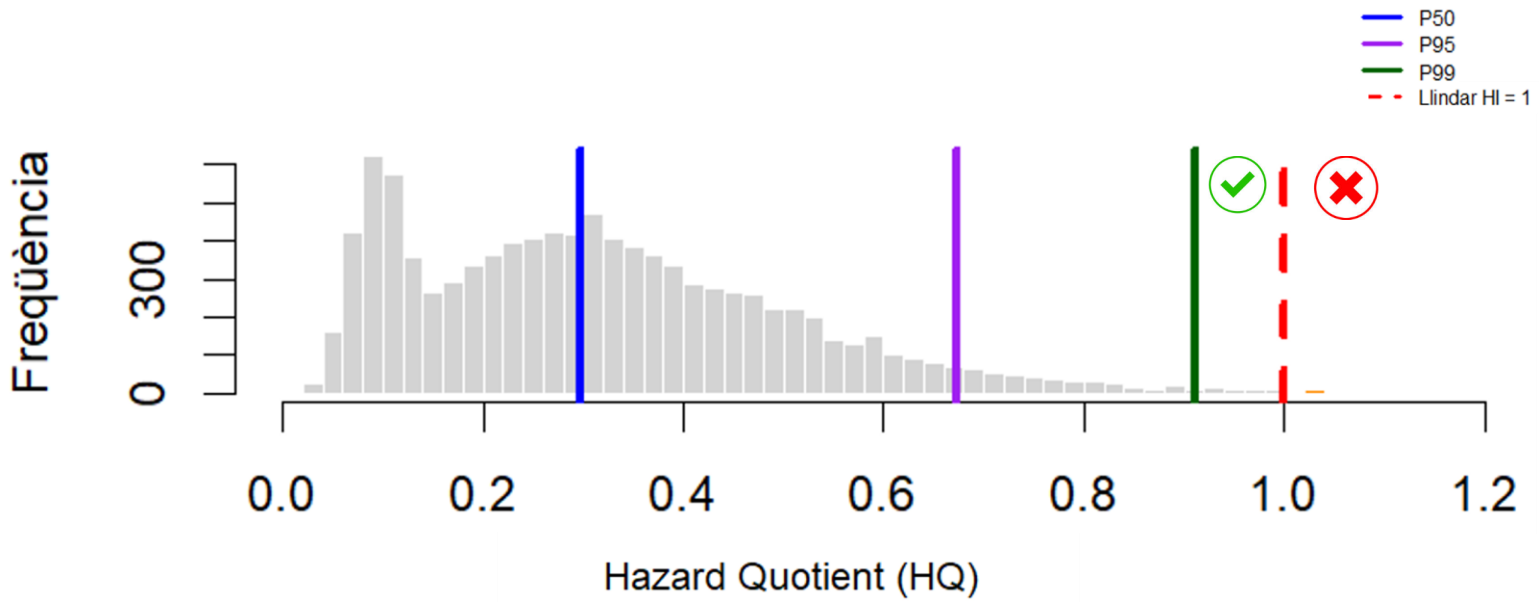
Bromoformo ($CHBr_3$) – Toxicidad muy alta
Dibromclormetano ($CHBr_2Cl$) – Toxicidad alta
Bromodiclormetano ($CHBrCl_2$) – Toxicidad moderada
Cloroformo ($CHCl_3$) – Toxicidad baja

Càtedra ATL de l'aigua potable
ATL Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat
Generalitat de Catalunya

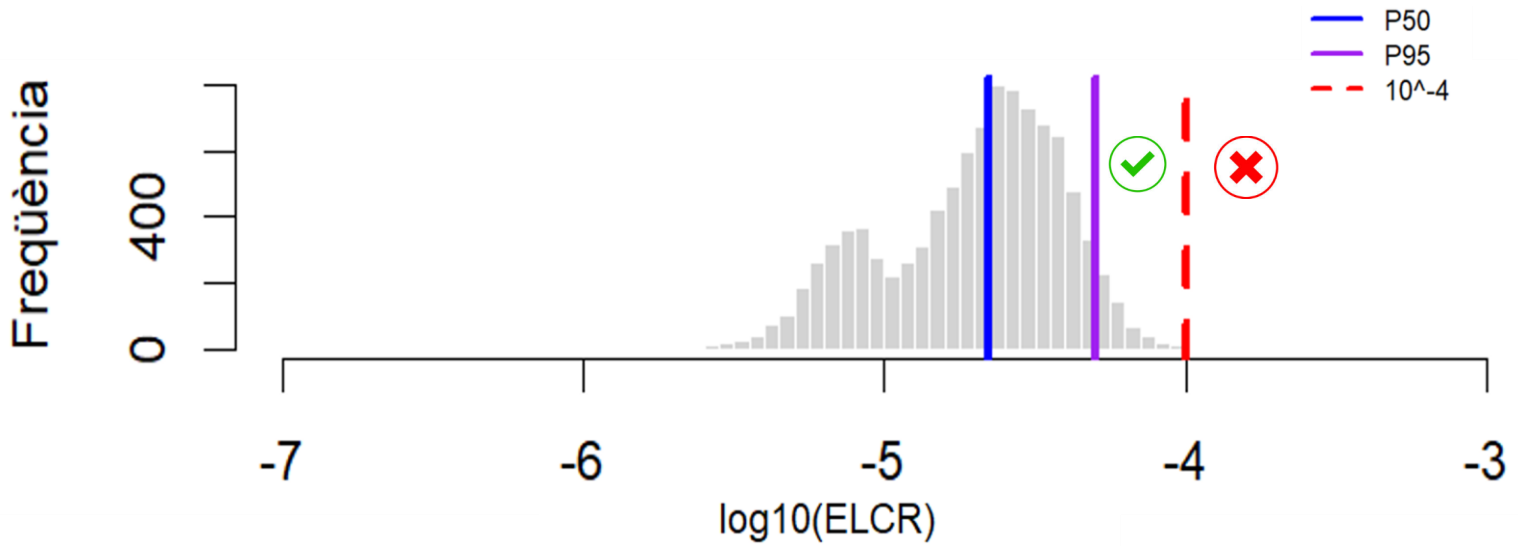
Ej: AHAs. Ác. Dibromoacético Salida planta 1

SF: 0,25mg/L
Rfd:0,0003 mg/kg/día
n = 199
Iteraciones= 10.000

Riesgo no carcinogénico (HQ)



Riesgo carcinogénico (ELCR)



Càtedra ATL de l'aigua potable
ATL Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat
Generalitat de Catalunya

Ejemplo usos QCRA

Science of the Total Environment 866 (2023) 161339

Contents lists available at ScienceDirect

Science of the Total Environment

journal homepage: www.elsevier.com/locate/scitotenv

recurso

Indirect potable water reuse to face drought events in Barcelona city. Setting a monitoring procedure to protect aquatic ecosystems and to ensure a safe drinking water supply

Antoni Munné [a,*], Carolina Solà [a], Elisabet Ejarque [a], Josep Sanchís [a], Pere Serra [b], Irene Corbella [b], Mercè Aceves [c], Belen Galofré [d], M. Rosa Boleda [d], Miquel Paraira [d], Jordi Molist [a]

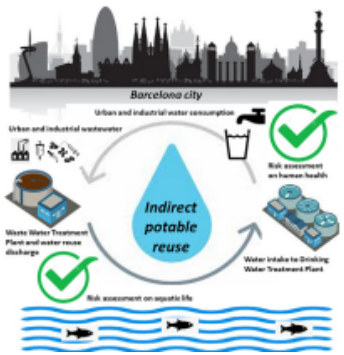
[a] Catalan Water Agency, c/ Provença 260, 08036 Barcelona, Spain
[b] Public Health Agency of Catalonia, Roc Boronat 81, 08182 Barcelona, Spain
[c] Barcelona Metropolitan Area, C/62, 18, Zona Franca, 08040 Barcelona, Spain
[d] Aigües de Barcelona, General Batet 1-7, 08028 Barcelona, Spain

potable

HIGHLIGHTS

- A real-scale indirect potable water reuse trial under simulated drought conditions was conducted.
- Three microbial indicators and 376 relevant micropollutants were monitored.
- Trial showed ten micropollutants that could pose a risk on aquatic life, and one to human health.
- Chlorination of reclaimed water did not improve microbiological quality but it generated DBPs.
- Indirect potable water reuse becomes a feasible alternative to cope with severe droughts.

GRAPHICAL ABSTRACT



Science of the Total Environment 958 (2025) 177868

Contents lists available at ScienceDirect

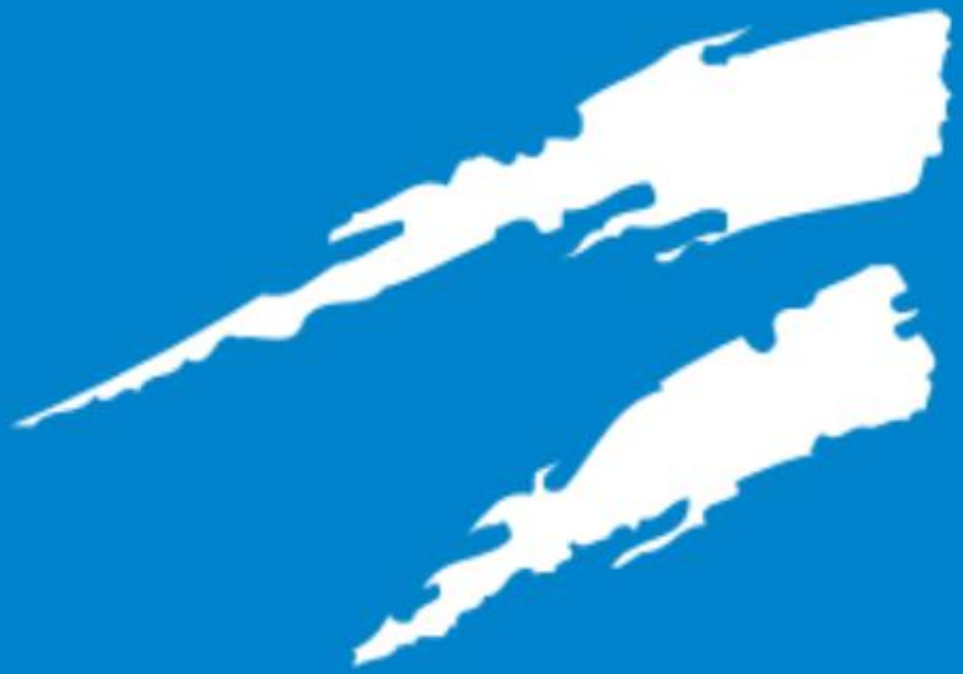
Science of the Total Environment

journal homepage: www.elsevier.com/locate/scitotenv

A tiered assessment of human health risks associated with exposure to persistent, mobile and toxic chemicals via drinking water

M.J. Whelan [a,*], E. Pemberton [b,1], C.B. Hughes [b,2], C. Swansborough [b], E.H. Goslan [c], T. Gouin [d], V.A. Bell [e], E. Bird [b,3], S. Bull [f], L. Segal [g], S.H. Cook [b], C. Jephcote [a], S. Fane [h,4]

Moltes gràcies per la vostra atenció



Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat

www.atl.cat
comunicacio@atl.cat
direccio@atl.cat
fvalero@atl.cat

© L'Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat permet la reutilització dels continguts i de les dades sempre que es citi la font i la data d'actualització, que no es desnaturalitzi la informació i que no es contradigui amb una llicència específica.

Càtedra ATL de l'aigua potable

ATL Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat

Generalitat de Catalunya