

**CONAMA 2022**

CONGRESO NACIONAL DEL MEDIO AMBIENTE

# Impacto del uso de productos fitosanitarios en cultivos

Análisis de la contaminación en suelos,  
ríos y entornos marinos



TÍTULO

---

**Autor Principal:** Mariano González García (UNIR)

**Otros autores:** Rosana González Combarros (UNIR); José Ignacio López Sánchez (UNIR); Efrén Pérez Santín (UNIR)

## ÍNDICE

1. Resumen
2. Palabras clave
3. Introducción
4. Materiales y métodos
5. Resultados y discusión
6. Conclusiones
7. Bibliografía
8. Agradecimiento

## 1. RESUMEN

El uso de fitosanitarios en la actividad agrícola es comúnmente extendido tanto a nivel nacional como en la Unión Europea. Actualmente, en la mayoría de los cultivos se emplean estos productos por una amplia diversidad geográfica y climática. La utilización de los productos fitosanitarios garantiza un alto rendimiento de la producción, que permite a las empresas dedicadas al sector agroalimentario proporcionar producto de alta calidad y ser competitivas en el actual contexto de mercados globales. El empleo de productos químicos es necesario para el control de las plagas. Sin embargo, presentan efectos secundarios indeseados; como la contaminación de suelos y aguas por mecanismos como drenaje, lixiviación y acumulación de sustancias fitosanitarias, produciendo un alto daño medioambiental e importantes perjuicios a la salud humana. Por este motivo, es imprescindible utilizar racionalmente los fitosanitarios con el objetivo de controlar la contaminación de suelos y aguas (acuíferos, ríos y entornos marinos entre otros) que potenciaría los efectos perniciosos de estas sustancias sobre el medio ambiente y la salud de las personas. El uso tan extendido de fitosanitarios en la actividad agrícola plantea la necesidad de reducir el impacto en ecosistemas naturales: suelos, acuíferos, ríos y entornos marinos. Para ello, el uso de modelos de predicción de toxicidad es una herramienta cada vez más utilizada que ayuda en la toma de decisiones. Se plantea aquí su utilización para minimizar la contaminación del medio ambiente y reducir así la incorporación de los agentes químicos a la cadena alimentaria. En este estudio, se ha analizado el impacto de agentes fitosanitarios en entornos medioambientales basado en el empleo de herramientas predictivas de inteligencia artificial. Los resultados obtenidos permiten determinar la toxicidad, minimizando los ensayos de laboratorio y experimentos en campo o con animales, que han sido tradicionalmente utilizados. La rapidez, confiabilidad y menor costo del uso de modelos de predicción de toxicidad permitirán superar los problemas éticos y legislativos actuales de determinados ensayos que involucran estos fitosanitarios.

## 2. PALABRAS CLAVE

Contaminación, sostenibilidad, fitosanitarios; modelización; entornos marinos.

## 3. INTRODUCCIÓN

La actividad agrícola tiene gran importancia en la Unión Europea, especialmente en España donde hay una gran variedad de cultivos por su diversidad geográfica y climática. Debido a la exigencia de la globalización y para poder ser competitivos en los mercados actuales, se necesita garantizar unas producciones y unos rendimientos muy altos que favorezcan la competitividad de las propias explotaciones<sup>1-3</sup>. Por ello, la agricultura actual necesita el empleo de productos químicos tales como fertilizantes y pesticidas necesarios en el control de las plagas, que permita obtener altos rendimientos y productos de alta calidad. Esto genera efectos secundarios como la posible contaminación de suelos y aguas por acumulación de estos productos con consecuentes daños ambientales y perjuicio a la salud humana<sup>4-6</sup>.

La toxicidad causada por los plaguicidas, que afecta tanto a los ecosistemas como a la salud humana, es reconocida por las autoridades a nivel mundial, europeo y nacional<sup>7-10</sup>. Por este motivo, en la Unión Europea se construyó un marco normativo que permite una comercialización regulada y segura. Por un lado, la DIRECTIVA 2009/128/CE<sup>11</sup> y sus posteriores modificaciones, estableció un marco de actuación comunitaria para lograr un uso sostenible de los plaguicidas. La otra disposición legal de referencia importante sobre los productos fitosanitarios es el Reglamento (CE) nº 1107/2009<sup>12</sup> relativo a la comercialización de productos fitosanitarios y por el que se modifican las Directivas 79/117/CEE y 91/414/CEE del Consejo. Este reglamento establece el procedimiento y los requisitos para que las sustancias activas para ser aprobadas en la Unión Europea.

Por ello, es imprescindible asegurar un uso adecuado de los fitosanitarios y controlar la acumulación y contaminación en el medio ambiente, para lo que es necesario el desarrollo de modelos de simulación que realicen predicciones de contaminación por el uso de los pesticidas, y ayuden en la toma de decisiones. Debido a que los residuos de plaguicidas pueden llegar al medio acuático a través de la escorrentía, la lixiviación y los retornos agrícolas, así como la absorción por parte de las plantas<sup>13,14</sup>. La presencia de plaguicidas en el agua es el resultado del transporte de los campos agrícolas a los arroyos, ríos, estanques y lagos. Pero son muchos los factores que influyen en el transporte de un plaguicida en el medio ambiente, como las propiedades fisicoquímicas de la molécula, patrones de aplicación, propiedades del suelo y prácticas de manejo, topografía y condiciones climáticas. También puede suceder la contaminación de aguas superficiales a través de otros procesos, como los flujos a través de grietas del suelo, deriva de la pulverización y desecho directo de los lavados de los rociadores a los ríos o cursos de agua que, aunque esté prohibido sucede en ocasiones. Teniendo todo esto en cuenta, es cada vez más importante y necesario realizar una gestión adecuada y responsable de estos productos de uso agrícola para evitar la contaminación de las aguas y suelos, para lo que se ve necesario el diseño de herramientas de control y predicción del comportamiento de estos contaminantes.

La aplicación de la inteligencia artificial (IA) se está empleando para la determinación de las propiedades toxicológicas de los compuestos químicos en diferentes campos, experimentado un crecimiento exponencial en últimos años <sup>15</sup>. Mediante el uso de Big Data e inteligencia artificial, la predicción de la toxicidad puede beneficiarse del aprendizaje automático. El desarrollo y uso de metodologías computacionales está en constante auge, con modelos diversos y confiables, favorecido con la entrada en escena de las metodologías computacionales basadas en Deep Learning (DL). El desarrollo de sistemas inteligentes permite reducir el número de análisis de laboratorio, reduciendo así los costes económicos y medioambientales al predecir el comportamiento de los contaminantes estudiados en el medio ambiente (Figura 1).



**Figura 1.** Diagrama del modelo de predicción y aplicación de los sistemas inteligentes a la contaminación de suelos y aguas.

Además de los ahorros monetarios, los sistemas inteligentes de predicción experta producen rápidamente datos de acumulación y contaminación, por lo que podemos estudiar el impacto de estos contaminantes usados en la actividad agrícola, permitiendo adoptar medidas de protección medioambientales de contaminación en suelos y aguas. No obstante, es importante verificar las predicciones basadas en modelos de IA, comparando sus resultados con datos experimentales.

Los objetivos del trabajo son los siguientes:

- Destacar la importancia de las herramientas de simulación en la contaminación de productos químicos.
- Predicción del comportamiento de contaminantes en escenarios de contaminación en suelos, ríos y entornos marinos.
- Reducción de los ensayos de laboratorio y experimentos en campo o con animales, que han sido tradicionalmente utilizados.
- Rapidez, confiabilidad y menor costo del uso de modelos de predicción de toxicidad.

## 4. MATERIALES Y MÉTODOS

### 4.1. PWC

Existen infinidad de herramientas disponibles para el modelado numérico del transporte de pesticidas en suelos y aguas subterráneas. Algunos de estos modelos utilizados en la literatura científica abordan el transporte y destino de sustancias químicas en Zonas No Saturadas (NSZ)<sup>16-19</sup>. El objetivo de todos estos modelos es la simulación del transporte de pesticidas a través de la NSZ hasta llegar a los acuíferos. Adicionalmente, algunos de estos modelos proponen, medidas de control y corrección una vez el suelo o las aguas subterráneas han sido contaminadas. De modo que, se puede afirmar que el uso de estos modelos permite la predicción de la movilidad y la persistencia de los pesticidas, estableciendo los riesgos que conlleva su utilización en la salud o en el medio ambiente<sup>20</sup>.

En este trabajo se decidió utilizar el modelo PRZM5 (Pesticide Root Zone Model versión 5.08) incluido en Pesticide Water Calculator (PWC) debido a la ventaja que ofrece frente a otros modelos numéricos similares<sup>20</sup>.

PWC es una interfaz gráfica de usuario que estima las concentraciones de pesticidas en aguas superficiales y subterráneas que resultan a consecuencia de la aplicación de pesticidas en los cultivos. La calculadora permite el uso tanto del modelo PRZM5 como Variable Volume Water Model (VVWM)<sup>21</sup>.

PRZM5 es un modelo unidimensional y dinámico que se enfoca en el transporte de pesticidas en la zona no saturada del acuífero en una escala diaria y una dimensión vertical, dando como resultado principal la concentración de pesticida justo en la zona situada inmediatamente debajo de la raíz de la planta, es decir, debajo de la superficie freática<sup>22</sup>. Por otro lado, VVWM permite simular el movimiento y degradación de los pesticidas que llegan a un volumen de agua superficial<sup>20</sup>.

PRZM5 es un software que simula el destino de los pesticidas en el medio ambiente utilizando variables como las características del clima, suelo, hidrología y cultivo. Los valores de salida se obtienen en términos de concentraciones diarias, medias y máximas de pesticidas, siguiendo los términos establecidos por la USEPA<sup>23</sup>.

El modelo integra elementos físicos, químicos y biológicos que ocurren durante el proceso de filtración del pesticida a lo largo del movimiento vertical del agua a través del suelo. Estos procesos son:

- Crecimiento de cultivo
- Irrigación
- Precipitación y deshielo
- Escorrentía
- Interceptación de agua por la cubierta vegetal.

## TÍTULO

---

- Evaporación
- Lixiviación
- Erosión
- Temperatura del suelo
- Aplicación de producto y lavado foliar
- Volatilización química

De modo que, para simular el destino final del pesticida en estudio, que ha sido rociado en un cultivo concreto, y conocer las consiguientes concentraciones de este en las aguas subterráneas, PWC requiere cuatro categorías de parámetros de entrada <sup>19</sup>:

- 1) El modo y aplicación del pesticida y las características fisicoquímicas del mismo (por ejemplo, presión de vapor, solubilidad en agua y peso molecular). El modelo permite seleccionar la fecha de aplicación del pesticida y la masa aplicada.
- 2) Características locales/regionales del clima, suelo, hidrología y fenológicas del cultivo.
- 3) Datos relacionados con las dimensiones geométricas y características fisicoquímicas de los cuerpos de agua subterránea. Características limnológicas y dimensiones del cuerpo de agua receptor.
- 4) Datos relacionados con el destino del contaminante y las características del transporte (por ejemplo, fotólisis, vida media del plaguicida en el suelo, degradación foliar e hidrólisis). Procesos de erosión y escorrentía de la zona en estudio.

PRZM5 describe los procesos hidráulicos y químicos mediante las ecuaciones que se describen a continuación (1-4). El flujo de agua en una zona insaturada fue descrito mediante la ecuación 1<sup>24</sup>.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(\theta) \frac{\partial h}{\partial t} \right] \quad (1)$$

donde:

$K(\theta)$ : conductividad hidráulica no saturada (cm/s)

$\theta$ : contenido de agua del suelo

$h$ : altura hidráulica (m)

$z$ : coordenada vertical (m)

$t$ : tiempo (s)

Los diferentes procesos fisicoquímicos que experimenta el pesticida en su paso a través de la zona no saturada se describen en las ecuaciones mostradas a continuación 2-4. En ellas se tienen

en cuenta las diferentes fases en las que se puede encontrar el pesticida, disuelto, adsorbido y gas<sup>25</sup>.

$$A\Delta z \frac{\partial(C_w\theta)}{\partial t} = J_D - J_V - J_{DW} - J_U + J_{QR} + J_{APP} + J_{FOF} \pm J_{TRN} \quad (2)$$

$$A\Delta z \frac{\partial(C_s\rho_s)}{\partial t} = -J_{DS} - J_{ER} \quad (3)$$

$$A\Delta z \frac{\partial(C_g a)}{\partial t} = -J_{GD} - J_{DG} \quad (4)$$

donde:

A: sección transversal de la columna de suelo (cm<sup>2</sup>)

$\Delta z$ : profundidad (cm)

$C_w$ : concentración de contaminantes disuelto en agua (g/cm<sup>3</sup>)

$C_s$ : concentración del contaminante es suelo (g/g)

$C_g$ : concentración del contaminante en la fase gaseosa (g/cm<sup>3</sup>)

$\theta$ : contenido volumétrico de agua (volumen de agua intersticial/volumen total de la muestra)  
(cm<sup>3</sup>/cm<sup>3</sup>)

a: contenido volumétrico de aire en el suelo (cm<sup>3</sup>/cm<sup>3</sup>)

$\rho_s$ : densidad del suelo (g/cm<sup>3</sup>)

t: tiempo (días)

$J_D$ : flujo másico debido a la dispersión y difusión en la fase disuelta (g/día)

$J_V$ : flujo másico por advección en la fase disuelta (g/día)

$J_{GD}$ : flujo másico debido a la dispersión y difusión en fase gaseosa (g/día)

$J_{DW}$ : flujo másico por degradación en fase disuelta (g/día)

$J_{DG}$ : flujo másico debido a la degradación en fase gaseosa (g/día)

$J_U$ : flujo másico de la fase disuelta debido a la absorción radicular (g/día)

$J_{QR}$ : flujo másico de escorrentía (g/día)

$J_{APP}$ : flujo másico de la aplicación de plaguicidas al suelo (g/día)

$J_{FOF}$ : flujo másico proveniente de los cultivos al suelo (g/día)

$J_{DS}$ : flujo másico debido a la degradación química del contaminante adsorbido (g/día)

$J_{ER}$ : flujo másico (pérdida) por disolución o erosión de sedimentos (g/día)

$J_{TRN}$ : flujo másico debido a otras reacciones (g/día)

Las ecuaciones de balance de materia aplicadas en PWC asumen que todas las sustancias presentes en el agua y los sedimentos están en condiciones termodinámicas de equilibrio<sup>19,26</sup>.

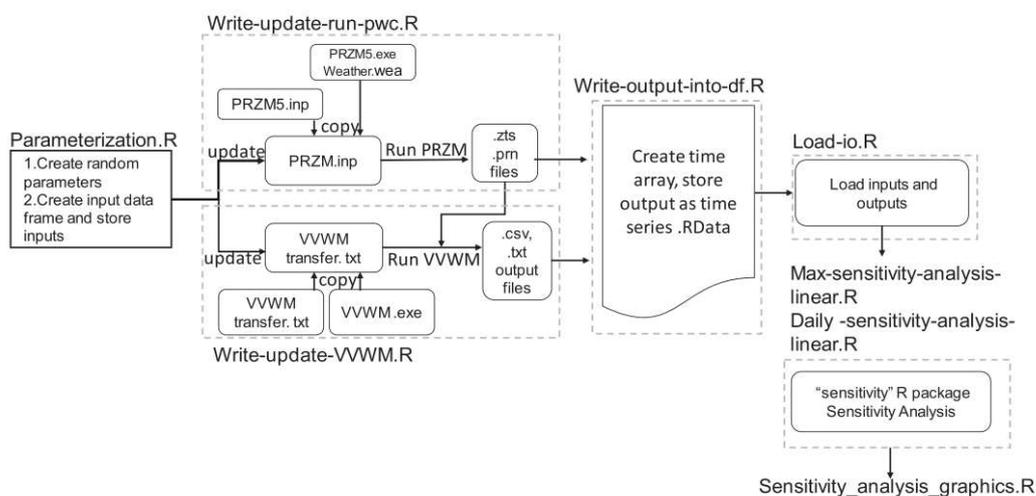
PRZM5 calcula la escorrentía y la erosión mediante método del número de la curva del Servicio de Conservación de Recursos Nacionales<sup>27</sup> y la Ecuación Universal de Pérdida del Suelo<sup>28</sup>, respectivamente.

Los cálculos de escorrentía comienzan después de que se observa una cantidad mínima de precipitación. A medida que aumenta la precipitación, los volúmenes de escorrentía se acercan a los volúmenes de precipitación. Este sencillo método de estimación de escorrentía es apropiado para simulaciones de pesticidas<sup>20</sup>.

Las concentraciones del plaguicida disuelto, adsorbido y en fase gaseosa en el suelo se calculan considerando los procesos de escorrentía superficial, erosión del suelo, degradación, volatilización, lavado de la superficie de la hoja, absorción de las plantas, filtración, dispersión y sorción<sup>20</sup>. La ecuación de transporte vertical se resuelve utilizando un esquema de diferencias finitas<sup>23</sup>.

En la construcción de archivos meteorológicos en un formato de archivo de entrada para poder ejecutar en PWC se utiliza el paquete R llamado PWCfilegenerator v0.1.0<sup>19</sup> diseñado para este fin y está disponible en el siguiente repositorio de GitHub: <https://github.com/flor14/PWCfilegenerator>.

En la Figura 2, se puede ver un esquema de la configuración del modelo con los pasos necesarios para la modelización.



**Figura 2.** Estructura del script PWC R. (Sinnathamby et al., 2020)

## 4.2. CONFIGURACIÓN DEL MODELO Y PARAMETRIZACIÓN

Los productos químicos formulados se comercializan individualmente en cantidades exactas de ingredientes activos, tal y como se muestran en las etiquetas de los productos. La toxicidad aditiva supone un riesgo entre compuestos químicos en los que se pueden producir un aumento de la toxicidad debido a las sinergias de estos. En este estudio, se ha realizado un análisis de la interacción entre diferentes productos químicos seleccionando dos insecticidas ampliamente utilizados en una gran variedad de cultivos alimentarios y forrajeros terrestres, cultivos no alimentarios terrestres, cultivos alimentarios/no alimentarios de invernadero y sitios interiores y exteriores no agrícolas, como son el Dimetoato y Clorpirifos<sup>15</sup> y determinando la toxicidad aditiva (suponiendo respuesta-adición) de la mezcla en comparación con cualquiera de los dos químicos por separado. En la Figura 3 y Figura 4 se puede ver la fórmula molecular del Dimetoato y Clorpirifos respectivamente.

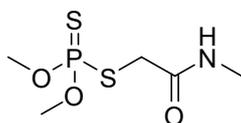


Figura 3. Fórmula molecular del Dimetoato. (PubChem., 2022)

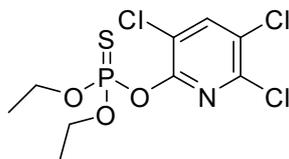


Figura 4. Fórmula molecular del Clorpirifos. (PubChem., 2022)

Las propiedades fisicoquímicas de los insecticidas estudiados que se han utilizado en la simulación de este estudio se pueden ver a continuación en la Tabla 1:

Tabla 1. Propiedades fisicoquímicas de los insecticidas estudiados.

Parámetros	Valores Clorpirifos	Valores Dimetoato
Fórmula química	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> Cl <sub>3</sub> NO <sub>3</sub> PS	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> NO <sub>3</sub> PS <sub>2</sub>
Peso molecular	350.6 g/mol	229,26 g/mol
Solubilidad del agua a 20 °C	0.00476 mg/L	23.8 g/L
Log Kow a 25°C	4.7	0.86

Fuente: PubChem, 2022

## 5. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Teniendo en cuenta los valores de ecotoxicidad de los compuestos químicos individuales, se realizó la simulación de la mezcla de Dimetoato y Clorpirifos. La ecotoxicidad de los productos químicos de manera individual se puede ver en la Tabla 2:

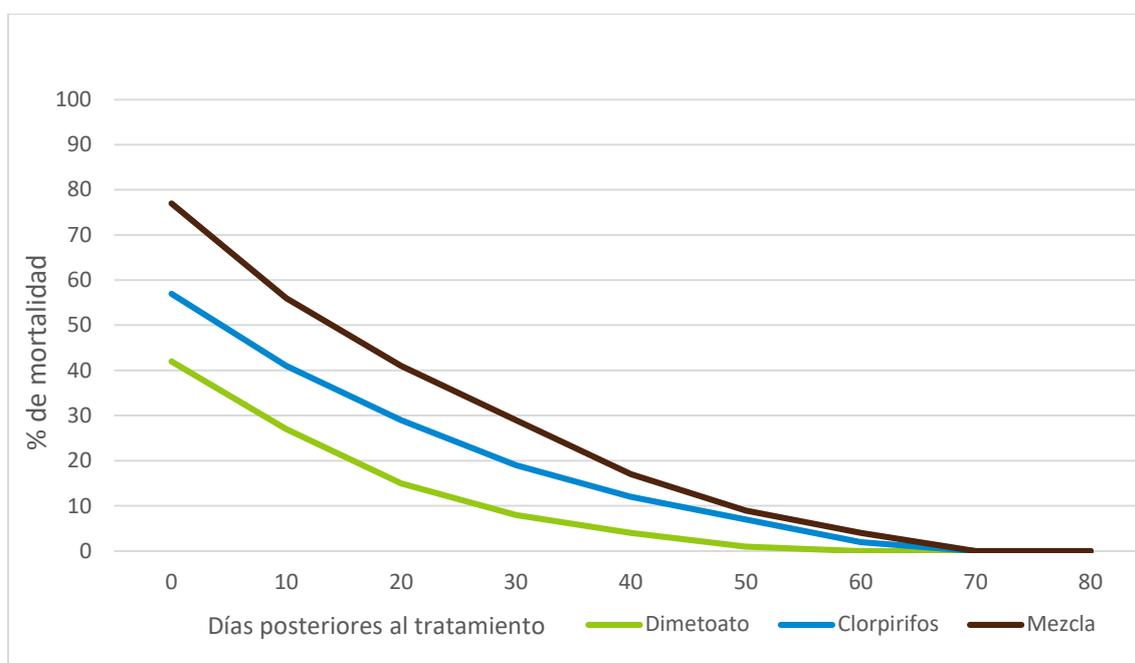
**Tabla 2.** Ecotoxicidad del Clorpirifos y Dimetoato

Especie	Valores Clorpirifos	Valores Dimetoato
Peces LC <sub>50</sub> (96 h)	0,002-0,010 mg/l (bluegill sunfish)	2.5 mg/L
Daphnia EC <sub>50</sub> (48 h)	1,7µg/l	30.2 mg/L
Algae EC <sub>50</sub> (72h)	>0,4 mg/l (Senastrum capricornutum)	>100 mg/L (4d, Scenedesmus pannonicus)
Aves LC <sub>50</sub> (8 días)	180 mg/Kg (mallard duck)	41.7 mg/Kg (ánade real)
Abejas LD <sub>50</sub> (oral)	360 ng/abeja	0,15 µg/abeja

Fuente: Arago, 2022

Se realizó la parametrización en el PWC con las propiedades fisicoquímicas de los compuestos químicos estudiados, con el fin de estudiar su impacto en el entorno medioambiental y su impacto en la contaminación en suelos, ríos y entornos marinos, en los casos que estos dos compuestos se presentarán de forma conjunta. Los resultados mostraron un incremento de la ecotoxicidad de los compuestos químicos de manera conjunta comparado con la presencia de cada compuesto de manera individualizada.

En la Figura 5 se puede ver una representación de los porcentajes de mortalidad comparando los compuestos químicos de manera individual y cuando aparecen mezclados de forma conjunta.



**Figura 5.** Representación gráfica de los porcentajes de mortalidad (2022)

Estos resultados demuestran la interacción de los compuestos químicos entre sí donde se pueden observar sinergismos entre ellos y obtener productos resultantes más tóxicos que los compuestos químicos iniciales cuando se presentan de forma separada y su relevancia en la contaminación de suelos, ríos y entornos marinos.

## 6. CONCLUSIONES

El uso de fitosanitarios en la actividad agrícola es comúnmente extendido y la toxicidad causada por los plaguicidas afecta tanto a los ecosistemas como a la salud humana. Los productos químicos formulados se presentan de forma individualizada, pero pueden llegar a interactuar entre ellos produciendo sinergismos o antagonismos como consecuencia de la presencia de una mezcla de los compuestos químicos en el ambiente o por realizar una mezcla de ellos para posteriormente realizar la aplicación. La toxicidad aditiva supone un riesgo entre compuestos químicos en los que se pueden producir un aumento de la toxicidad de los productos químicos debido a las sinergias de estos. Este estudio de simulación ha demostrado el efecto aditivo de dos compuestos químicos (clorpirifos y dimetoato) en el que se obtiene como resultado unos productos finales más tóxicos que los compuestos químicos iniciales cuando se presentan de forma separada y su relevancia en la contaminación de suelos, ríos y entornos marinos. Es necesario realizar más trabajos de simulación entre diferentes pesticidas y compuestos químicos para poder estudiar el comportamiento de los mismos y evitar los efectos nocivos de la mezcla. Así mismo, es de gran importancia verificar las predicciones basadas en modelos de IA, comparando sus resultados de las predicciones con los datos experimentales.

## 7. BIBLIOGRAFÍA

- [1] Kovač M, Bulaić M, Jakovljević J, Nevistić A, Rot T, Kovač T, et al. Mycotoxins, pesticide residues, and heavy metals analysis of Croatian cereals. *Microorganisms*. 2021;9(2):216.
- [2] Qu C, Albanese S, Li J, Cicchella D, Zuzolo D, Hope D, et al. Organochlorine pesticides in the soils from Benevento provincial territory, southern Italy: Spatial distribution, air-soil exchange, and implications for environmental health. *Sci Total Environ*. 2019;674:159–70.
- [3] Zambito Marsala R, Capri E, Russo E, Bisagni M, Colla R, Lucini L, et al. First evaluation of pesticides occurrence in groundwater of Tidone Valley, an area with intensive viticulture. *Sci Total Environ*. 2020 Sep;736:139730.
- [4] Campo J, Masiá A, Blasco C, Picó Y. Occurrence and removal efficiency of pesticides in sewage treatment plants of four Mediterranean River Basins. *J Hazard Mater*. 2013;263:146–57.
- [5] Damásio J, Barceló D, Brix R, Postigo C, Gros M, Petrovic M, et al. Are pharmaceuticals more harmful than other pollutants to aquatic invertebrate species: a hypothesis tested using multi-biomarker and multi-species responses in field collected and transplanted organisms. *Chemosphere*.

2011;85(10):1548–54.

- [6] Masiá A, Campo J, Navarro-Ortega A, Barceló D, Picó Y. Pesticide monitoring in the basin of Llobregat River (Catalonia, Spain) and comparison with historical data. *Sci Total Environ*. 2015;503:58–68.
- [7] de Castro Lima JAM, Labanowski J, Bastos MC, Zanella R, Prestes OD, de Vargas JPR, et al. “Modern agriculture” transfers many pesticides to watercourses: a case study of a representative rural catchment of southern Brazil. *Environ Sci Pollut Res* [Internet]. 2020;27(10):10581–98. Available from: <https://doi.org/10.1007/s11356-019-06550-8>
- [8] Kadlikova K, Vaclavikova M, Halesova T, Kamler M, Markovic M, Erban T. The investigation of honey bee pesticide poisoning incidents in Czechia. *Chemosphere*. 2021 Jan;263:128056.
- [9] Kafaei R, Arfaeinia H, Savari A, Mahmoodi M, Rezaei M, Rayani M, et al. Organochlorine pesticides contamination in agricultural soils of southern Iran. *Chemosphere* [Internet]. 2020;240:124983. Available from: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653519322222>
- [10] Si W-S, Wang S-Y, Zhang Y-D, Kong C, Bai B. Pesticides and risk assessment in Shanghai fruit and raw eaten vegetables. *Food Addit Contam Part B, Surveill*. 2021 Dec;14(4):245–55.
- [11] European Commission. Directive 2009/128/EC of the European Parliament and of the Council as regards of 21 October 2009 establishing a framework for Community action to achieve the sustainable use of pesticides. Vol. L309/71, *Official Journal of the European Union*. 2009.
- [12] European Commission. Regulation (EC) No 1107/2009 of the European Parliament and of the Council of 21 October 2009 concerning the placing of plant protection products on the market and repealing Council Directives 79/117/EEC and 91/414/EEC. *Off J Eur Union*. 2009;L 309/1.
- [13] Kafilzadeh F. Assessment of organochlorine pesticide residues in water, sediments and fish from Lake Tashk, Iran. *Achiev Life Sci*. 2015;9(2):107–11.
- [14] Rajmohan KS, Chandrasekaran R, Varjani S. A Review on Occurrence of Pesticides in Environment and Current Technologies for Their Remediation and Management. *Indian J Microbiol*. 2020 Jun;60(2):125–38.
- [15] Pérez Santín E, Rodríguez Solana R, González García M, García Suárez MDM, Blanco Díaz GD, Cima Cabal MD, et al. Toxicity prediction based on artificial intelligence: A multidisciplinary overview. *Wiley Interdiscip Rev Comput Mol Sci*. 2021;11(5):e1516.

- [16] Rodrigo-Ilarri J, Rodrigo-Clavero M-E, Cassiraga E, Ballesteros-Almonacid L. Assessment of Groundwater Contamination by Terbutylazine Using Vadose Zone Numerical Models. Case Study of Valencia Province (Spain). *Int J Environ Res Public Health*. 2020;17(9):3280.
- [17] Gabe Rothman, Meridith Fry, Chuck Peck, Jim Lin, Dirk Young, Faruque Khan JH. Guidance for Using the Volatilization Algorithm in the Pesticide in Water Calculator and Water Exposure Models. Agency USEP, editor. Washington, DC: Environmental Fate and Effects Division; 2015. 17 p.
- [18] Young, D.F.; Fry M. PRZM5 A Model for Predicting Pesticides in Runoff, Erosion, and Leachate Revision B. Office of Pesticide Programs US, editor. Washington, DC: Environmental Protection Agency; 2020.
- [19] D'Andrea MF, Letourneau G, Rousseau AN, Brodeur JC. Sensitivity analysis of the Pesticide in Water Calculator model for applications in the Pampa region of Argentina. *Sci Total Environ*. 2020;698:134232.
- [20] Pérez-Indoval R, Rodrigo-Ilarri J, Cassiraga E, Rodrigo-Clavero M-E. Numerical Modeling of Groundwater Pollution by Chlorpyrifos, Bromacil and Terbutylazine. Application to the Buñol-Cheste Aquifer (Spain). *Int J Environ Res Public Health*. 2021;18(7):3511.
- [21] Young DF. Pesticide in Water Calculator User Manual for Versions 1.50 and 1.52. US Environ Prot Agency, Washington, DC. 2016.
- [22] Carsel RF. Users manual for the pesticide root zone model (PRZM), release 1. Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, US, 1984.
- [23] Young DF. US Environmental Protection Agency Model for Estimating Pesticides in Surface Water. *Pestic Surf Water Monit Model Risk Assessment, Manag*. 2019;309–31.
- [24] Richards LA. Capillary conduction of liquids through porous mediums. *Physics (College Park Md)*. 1931;1(5):318–33.
- [25] Suárez LA. PRZM-3, a model for predicting pesticide and nitrogen fate in the crop root and unsaturated soil zones: users manual for release 3.12. 2. US Environ Prot Agency (EPA), Washington, DC. 2005.
- [26] Rumschlag SL, Bessler SM, Rohr JR. Evaluating improvements to exposure estimates from fate and transport models by incorporating environmental sampling effort and contaminant use. *Water Res*. 2019;156:372–82.
- [27] Cronshey RG, Roberts RT, Miller N. Urban hydrology for small watersheds (TR-55 Rev.). In: *Hydraulics and hydrology in the small computer age*. ASCE; 1985.

p. 1268–73.

[28] Williams JR. Sediment-yield prediction with universal equation using runoff energy factor. Present Prospect Technol Predict sediment yield sources. 1975;244–52.

## 8. AGRADECIMIENTOS

Los autores quieren agradecer la financiación recibida dentro del proyecto “Modelización del impacto de pesticidas basada en Inteligencia Artificial en relación al cambio climático (IMPESTIA) de la Universidad Internacional de La Rioja (UNIR) para poder llevar a cabo este trabajo.