

## Resumen

El uso de fitosanitarios en la actividad agrícola está comúnmente extendido tanto a nivel nacional como en la Unión Europea. Actualmente, la mayoría de los cultivos emplean estos productos en una amplia diversidad geográfica y climática. La utilización de los productos fitosanitarios, 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 el uso eficiente de los fitosanitarios con el objetivo de controlar la contaminación de suelos y aguas (acuíferos, ríos y entornos marinos entre otros), y minimizar los efectos perniciosos sobre el medio ambiente y la salud de las personas. El uso de modelos de predicción de toxicidad es una herramienta cada vez más utilizada que ayuda en la toma de decisiones.

En este estudio, se ha analizado del impacto de agentes fitosanitarios en entornos medioambientales basado en el empleo de herramientas predictivas de inteligencia artificial. 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.

## Objetivos

- Destacar 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
- Rapidez, confiabilidad y Reducir el costo, rapidez y confiabilidad de uso de modelos de predicción de toxicidad.

## Materiales y métodos

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 [1]. 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) [2]. 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 [3]. Por otro lado, VVWM permite simular el movimiento y degradación de los pesticidas que llegan a un volumen de agua superficial [1]. 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 [4].

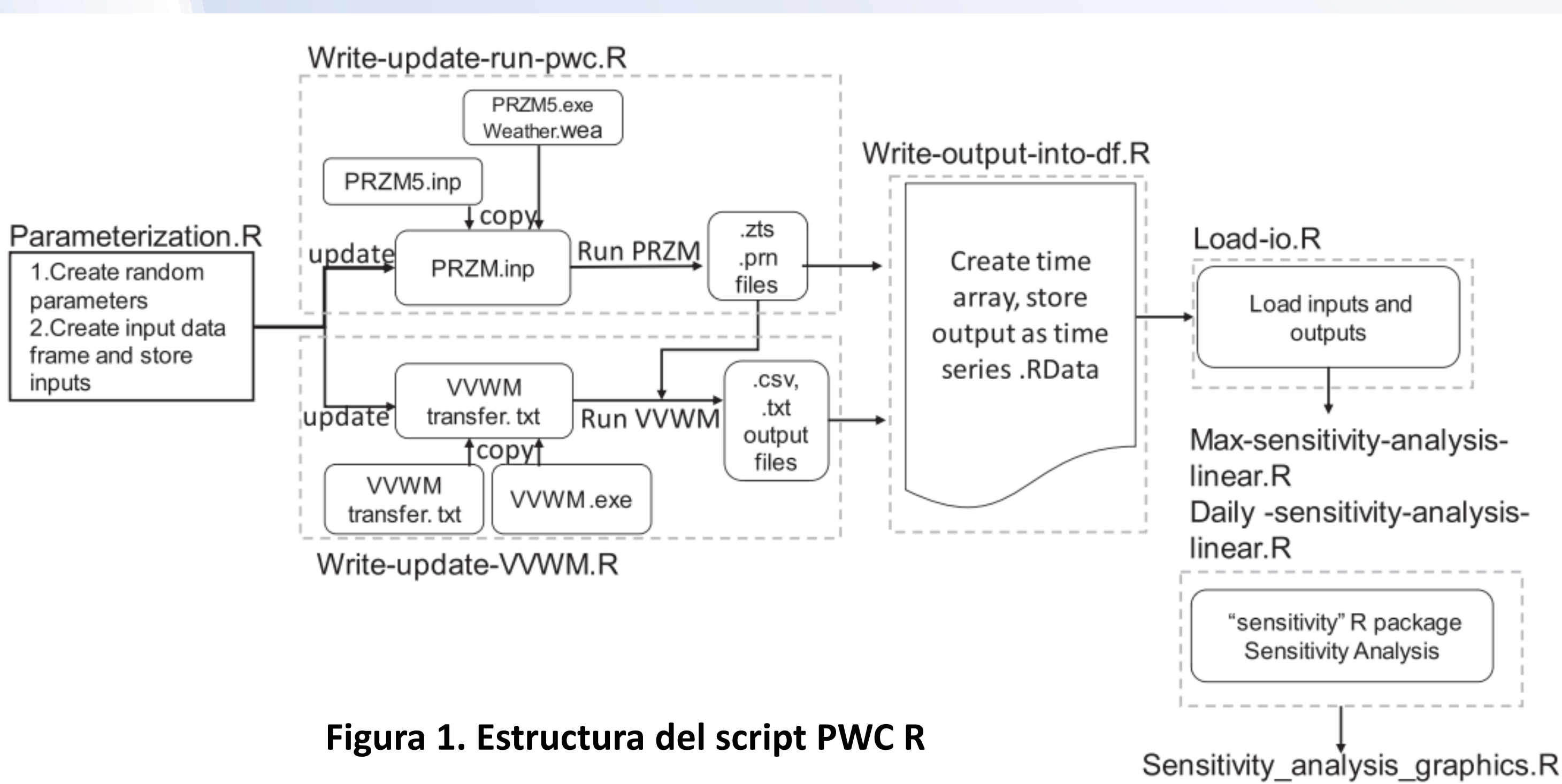


Figura 1. Estructura del script PWC R

Los productos químicos formulados se comercializan individualmente en cantidades exactas de ingredientes activos tal y como se recoge 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 estudio de la interacción entre diferentes productos químicos escogiendo dos insecticidas ampliamente utilizados como son el Dimetoato y Clorpirifos y estudiando la toxicidad aditiva (suponiendo respuesta-adición) de la mezcla resultante.

Tabla 1. Propiedades fisicoquímicas.

Parámetros	Valores Clorpirifos	Valores Dimetoato
Fórmula química	C <sub>9</sub> H <sub>11</sub> Cl <sub>3</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub> PS	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> N <sub>3</sub> O <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

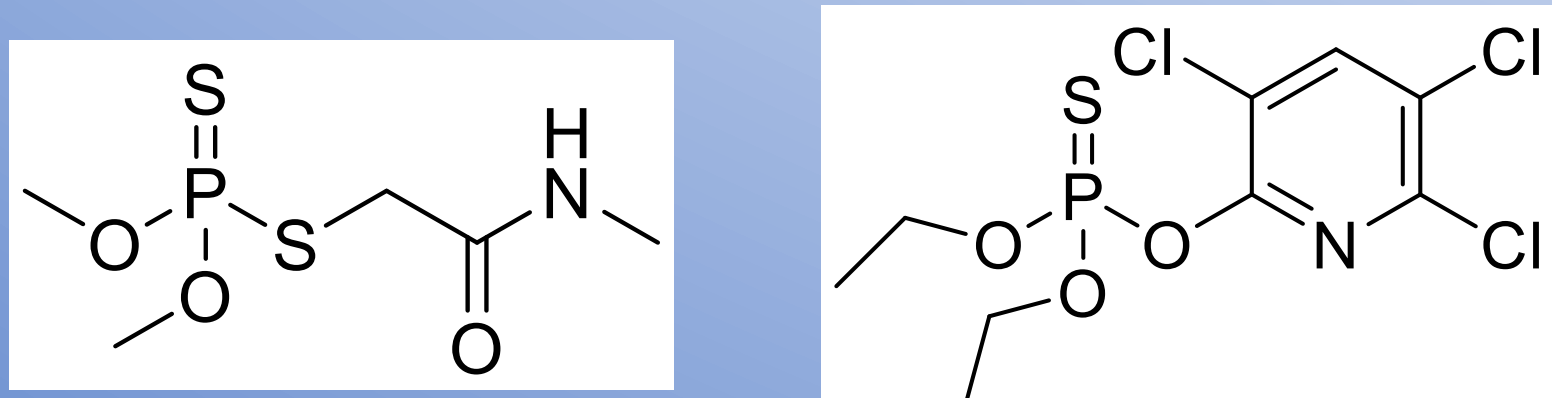


Figura 2. Fórmula molecular del Dimetoato y Clorpirifos.

## Resultados y discusión

Teniendo en cuenta los valores de ecotoxicidad de los compuestos químicos individuales, se realizó la simulación de la mezcla entre el Dimetoato y Clorpirifos. La ecotoxicidad de los productos químicos estudiados 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 (Selenastrum 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

Se parametrizó el PWC con las propiedades fisicoquímicas de los compuestos químicos, con el fin de estudiar su impacto en el entorno medioambiental y su impacto en la contaminación en suelos, ríos y entornos marinos, suponiendo que los 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 siguiente gráfica (Figura 3) se puede ver una representación de los porcentajes de mortalidad comparando los compuestos químicos de manera individual y cuando aparecen mezclados de forma conjunta.

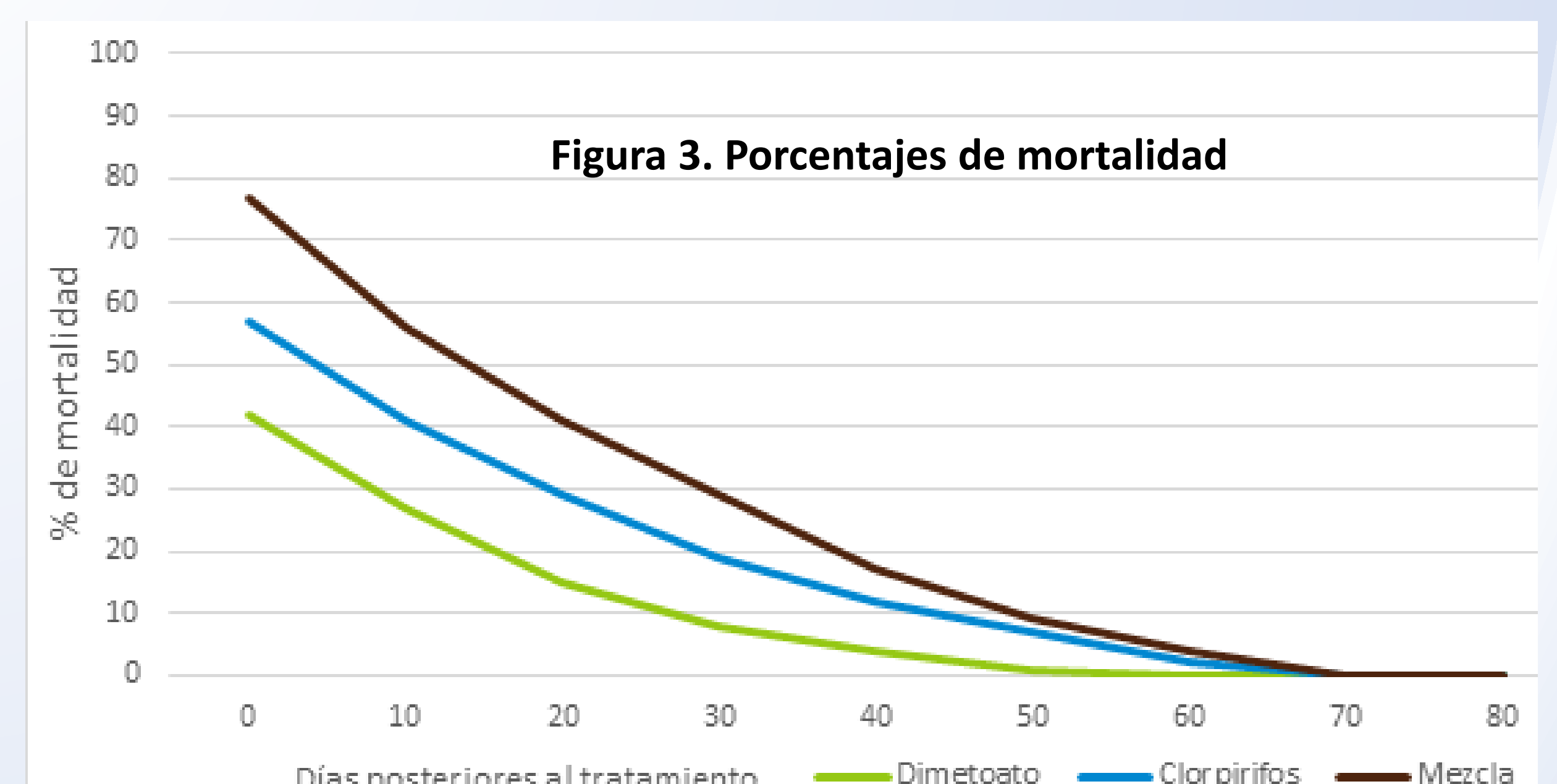


Figura 3. Porcentajes de mortalidad

## Conclusiones

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. Este estudio de simulación ha demostrado el efecto aditivo de los compuestos químicos clorpirifos y dimetoato. Se ha obtenido como resultado que la mezcla de los productos es de mayor toxicidad que los compuestos químicos iniciales.

## 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).

## Referencias

- Pérez-Indoalvo R, Rodrigo-Illarri 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.
- Young DF. Pesticide in Water Calculator User Manual for Versions 1.50 and 1.52. US Environ Prot Agency, Washington, DC. 2016.
- Carsel RF. Users manual for the pesticide root zone model (PRZM), release 1. Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, US, 1984.
- Young DF. US Environmental Protection Agency Model for Estimating Pesticides in Surface Water. Pestic Surf Water Monit Model Risk Assessment, Manag. 2019;309–31.