



UCAM

UNIVERSIDAD CATÓLICA
DE MURCIA

ESCUELA INTERNACIONAL DE DOCTORADO
Programa de Doctorado Tecnología de la Computación e
Ingeniería Ambiental

Estudio y predicción de la absorción de contaminantes
emergentes procedentes de aguas regeneradas en cultivos
hortícolas de la Región de Murcia.

Autor:

Mariano González García

Directores:

Dra. Dña. Carmen Fernández López

Murcia, septiembre de 2018



UCAM

UNIVERSIDAD CATÓLICA
DE MURCIA

ESCUELA INTERNACIONAL DE DOCTORADO
Programa de Doctorado Tecnología de la Computación e
Ingeniería Ambiental

Estudio y predicción de la absorción de contaminantes
emergentes procedentes de aguas regeneradas en cultivos
hortícolas de la Región de Murcia.

Autor:

Mariano González García

Directores:

Dra. Dña. Carmen Fernández López

Murcia, septiembre de 2018



UCAM

UNIVERSIDAD CATÓLICA
DE MURCIA

AUTORIZACIÓN DE LO/S DIRECTOR/ES DE LA TESIS
PARA SU PRESENTACIÓN

La Dra. Dña. Carmen Fernández López como Directora de la Tesis Doctoral titulada “Estudio y predicción de la absorción de contaminantes emergentes procedentes de aguas regeneradas en cultivos hortícolas de la Región de Murcia” realizada por D. Mariano González García en el Departamento de Ciencias Politécnicas, **autoriza su presentación a trámite** dado que reúne las condiciones necesarias para su defensa.

Lo que firmo, para dar cumplimiento al Real Decreto 99/2011, 1393/2007, 56/2005 y 778/98, en Murcia a 21 de septiembre de 2018

FERNANDEZ
LOPEZ
CARMEN -
22982780F

Firmado digitalmente
por FERNANDEZ
LOPEZ CARMEN -
22982780F
Fecha: 2018.09.21
19:05:25 +02'00'

UCAM



EIDUCAM
Escuela Internacional
de Doctorado

AGRADECIMIENTOS

Me gustaría dedicar las primeras palabras de agradecimiento para recordar a mi padre que, desde lo más alto, espero se sienta orgulloso de las capacidades y habilidades que he adquirido en el camino de mi vida hasta ahora recorrido. A mi madre que me enseñó desde niño que con el esfuerzo y trabajo constante de las cosas pequeñas se pueden llegar a conseguir metas más ambiciosas. Los dos juntos habéis trabajado duro para educarme en la persona que he llegado a ser.

A mi hermana y abuela.

A Marta, gracias por tu apoyo incondicional en todo momento en este proyecto. A mis hijos, Jorge y Jaime perdonad por no haberos dedicado todo el tiempo que me hubiera gustado, estoy convencido que algún día lo comprenderéis y valoraréis. Siempre lo tendré presente.

En segundo lugar, me gustaría agradecer a mi directora de tesis doctoral; a la Dra. Carmen Fernández López su esfuerzo y dedicación continua, por ser tan exigente y por su habilidad para explorar, aflorar y potenciar la parte investigadora que residía en mi interior; en todo momento has sido el candil para iluminarme en los momentos de menor lucidez y has caminado conmigo en todo el proceso de aprendizaje como investigador. Al Dr. Stefan Trapp y al Dr. Fabio Polesel de la Technical University of Denmark (DTU), por aportar y compartir sus conocimientos de tantos años de exitosa y reconocida trayectoria investigadora y por estar disponibles en todo momento que he necesitado ayuda de su departamento.

Al Dr. Andrés Bueno Crespo y a la Dra. Raquel Martínez España del Departamento de Ciencias Politécnicas del Grado en Ingeniería Informática de la UCAM, por su trabajo y colaboración en el desarrollo de modelos de simulación.

Al Dr. Francisco Pedrero por su ayuda y colaboración en el desarrollo de los experimentos realizados en invernadero.

A todos los compañeros del Grupo de investigación del IAMA de la UCAM y del CEBAS-CSIC, por su ayuda y asistencia tanto en campo como en laboratorio.

PUBLICACIONES/COMUNICACIONES DE LA TESIS

Artículos

González García, M., Fernández-López, C., Pedrero-Salcedo, F., Alarcón, J.J. (2018). Absorption of carbamazepine and diclofenac in hydroponically cultivated lettuces and human health risk assessment. *Agric Water Manag* 206, 42–47.

González García, M., Fernández-López, C., Bueno-Crespo, A., Martínez-España, R. (2018). Extreme learning machine-based prediction of uptake of pharmaceuticals in reclaimed water-irrigated lettuces in the Region of Murcia, Spain. *Biosyst Eng* (En Prensa).

Comunicaciones

González García, M., Pedrero, F., Fernández-López, C., Trapp, S. (Junio, 2016). Aguas regeneradas procedentes de una EDAR, destinada al riego de cultivos hortícolas bajo invernadero. Trabajo presentado en las II Jornadas de Investigación y Doctorado: Doctorado Industrial, Murcia, España.

González García, M. (Junio, 2016). Estudio de la presencia de fármacos en cultivos hortícolas regados con aguas regeneradas y su impacto en la salud humana. Trabajo presentado en el I Congreso Internacional QualeVitae sobre Calidad de Vida y Longevidad, Murcia, España.

González García, M., Fernández-López, C., Pedrero, F., Trapp, S. (Septiembre, 2016). Estudio de la presencia de contaminantes emergentes en aguas regeneradas procedentes de una EDAR, destinada al riego de cultivos hortícolas bajo invernadero. Trabajo presentado en el IX Congreso Ibérico de Gestión y Planificación del Agua, Valencia, España.

González García, M., Pedrero, F., Fernández-López, C. (Junio, 2017). Estudio de la absorción de contaminantes emergentes en lechuga regada con agua regenerada. Trabajo presentado en las III Jornadas de Investigación y Doctorado: Reconocimiento de los Doctores en el Mercado Laboral, Murcia, España.

González García, M., Polesel, F., Trapp, S., Fernández-López, C. (Julio, 2017). Fate prediction and mass balances verification of five pharmaceuticals compounds in Roldán-Balsicas WWTP (Murcia, Spain). Trabajo presentado en NEREUS COST ACTION ES1403 SUMMER SCHOOL. Advanced Treatment Technologies and Contaminants of Emerging Concern, Oporto, Portugal.

González García, M., Fernández-López, C, Polesel, F., Trapp, S. (Mayo, 2018). Predicting the fate of pharmaceuticals during wastewater treatment and crop irrigation with reclaimed wastewater. Trabajo presentado en SETAC Europe 28th Annual Meeting, Roma, Italia.

González García, M., Fernández-López, C. (Mayo, 2018). Significance to human health of Ibuprofen detected in vegetables irrigated with wastewater. Trabajo presentado en las IV Jornadas de Investigación y Doctorado: Women in Science, Murcia, España.

RESUMEN

Los recursos de agua dulce en el mundo son limitados y constituyen una pequeña parte de las reservas de agua. El uso de agua regenerada es una fuente valiosa para satisfacer la demanda de agua que contribuye a resolver la escasez de agua y la presión sobre los recursos hídricos. El empleo de estas aguas regeneradas procedentes de las Estaciones Depuradoras de Aguas Residuales (EDAR), plantean un dilema debido a que algunos contaminantes emergentes (CEs) no son eliminados por completo por las EDAR.

El principal objetivo de esta tesis doctoral ha sido la validación agronómica del tratamiento de aguas en lo que a CEs se refiere y la calibración de dos modelos de simulación. El primer modelo de simulación ha sido un Sistema Experto Inteligente (SEI) desarrollado por el Departamento de Ciencias Politécnicas del Grado en Ingeniería Informática de la UCAM y el segundo el modelo New Plant Uptake model for ionizable compounds 2 x 2 matrix. monovalent acids and bases (NPUM), desarrollados por la Technical University of Denmark (DTU) para predecir el comportamiento, la asimilación y la distribución de los CEs en las diferentes partes de las plantas. Se han seleccionado cinco CEs para estudiar su comportamiento en una EDAR representativa de la Región de Murcia y en diferentes cultivos expuestos a estos CEs que son regados con el efluente de dicha EDAR. Los CEs seleccionados han sido: carbamazepina (CBZ), diclofenaco (DCF), ibuprofeno (IBP), ketoprofeno (KTP) y naproxeno (NPX). Estos CEs han sido seleccionados dada su representatividad y en base a diversos estudios realizados en numerosos trabajos de investigación. Este estudio se ha realizado en un invernadero del CEBAS-CSIC anexo a la EDAR de Roldán, Lo Ferro-Balsicas (Murcia, España) ((UTM) X: 679615.7525, Y: 4185244.9214), cuya explotación está gestionada actualmente por la empresa ESAMUR. Este trabajo de investigación se dividió en dos experimentos. En un primer experimento se caracterizó el agua procedente de la EDAR de Roldán, Lo Ferro-Balsicas y se utilizó el efluente de esta EDAR como agua de riego de cultivos hortícolas característicos de la Región de Murcia (lechuga, perejil, repollo, brócoli y calabacín) estudiando el comportamiento y la respuesta de los cultivos hortícolas regados con el agua regenerada de esta EDAR, comprobando la posible acumulación de los CEs seleccionados (CBZ, DCF, IBP, KTP y NPX) en las diferentes partes de los cultivos estudiados y evaluar el riesgo potencial que supone para la salud humana su

incorporación en la cadena alimentaria. En un segundo experimento, se seleccionaron tres variedades de lechuga que se regaron con agua mezclada con dos CE (CBZ y DCF) a diferentes concentraciones y se estudió la acumulación de los CE en la parte comestible de las hojas y el posterior paso a la cadena alimentaria. Con los resultados obtenidos en este segundo experimento, se calibraron los dos modelos de simulación SEI y NPUM para predecir la asimilación y la distribución de los CE en las diferentes partes de los cultivos estudiados. Los resultados obtenidos en el primer experimento mostraron sólo presencia de IBP en la parte comestible de la lechuga, no encontrando acumulación del resto de CE (CBZ, DCF, KTP y NPX) en los cultivos estudiados. En el segundo experimento en el caso de la CBZ, las hojas mostraron niveles más altos de captación y mayores factores de bioconcentración (BCF) comparado con las raíces, esto se debe a la neutralidad y la hidrofobicidad media del CE. En el DCF, fueron las raíces las que mostraron niveles más altos de captación y mayores factores de bioconcentración (BCF), puede atribuirse a su alta hidrofobicidad y baja solubilidad en agua. Los resultados de este experimento se corresponden con los valores obtenidos por los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Se realizó una predicción de acumulación y concentración de CBZ y DCF en lechuga si se aprovechara el efluente de 10 EDAR de la Región de Murcia como agua de riego con los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Con el modelo de simulación NPUM se realizó también una predicción de acumulación de IBP, KTP y NPX en el cultivo de lechuga a diferentes concentraciones de CE. Tanto en los experimentos llevados a cabo en invernadero como en las predicciones desarrolladas por los dos modelos de simulación SEI y NPUM, podemos observar que las concentraciones diarias ingeridas de CE son inferiores a los límites aceptables, por lo tanto, según la evaluación realizada, la concentración de CE detectados en la parte comestible de las lechugas, no suponen ningún riesgo para la salud humana.

Además, gracias a la obtención de una buena simulación con los dos modelos planteados para predecir la absorción y la distribución de los CE en las diferentes partes de los cultivos estudiados, se comprueba que estas herramientas son de gran utilidad para poder ahorrar costes de laboratorio en analíticas, personal, planificación y tiempo que suponen cuando se requieren realizar estudios de esta envergadura.

Palabras clave: contaminantes emergentes (CE), Estaciones Depuradoras de Aguas Residuales (EDAR), cultivos, absorción, modelos de simulación, efluentes, riego.

ABSTRACT

Freshwater resources in the world are limited and constitute a small part of the water reserves. The use of reclaimed water is a valuable source to meet the demand for water that contributes to solving water scarcity and pressure on water resources. The use of these reclaimed waters from Wastewater Treatment Plants (WWTP) poses a dilemma because some emerging pollutants (CEs) are not completely eliminated by WWTP.

The main objective of this doctoral thesis has been the agronomic validation of water treatment as far as CEs are concerned and the calibration of two simulation models. The first simulation model has been an Intelligent Expert System (SEI) developed by the Department of Polytechnic Sciences of the Degree in Computer Engineering of the UCAM and the second the model New Plant Uptake model for ionizable compounds 2 x 2 matrix. monovalent acids and bases (NPUM), developed by the Technical University of Denmark (DTU) to predict the behaviour, the assimilation and the distribution of the CEs in the different parts of the plants. Five CEs have been selected to study their behavior in a WWTP representative of the Region of Murcia and in different crops exposed to these CEs that are irrigated with the effluent of the WWTP. The selected CEs have been: carbamazepine (CBZ), diclofenac (DCF), ibuprofen (IBP), ketoprofen (KTP) and naproxen (NPX). These CEs were selected due to their representativeness and based on various studies conducted in numerous research projects. This study was carried out in a greenhouse of the CEBAS-CSIC annexed to the Roldán WWTP, in Lo Ferro-Balsicas (Murcia, Spain) ((UTM) X: 679615.7525, Y: 4185244.9214), whose exploitation is currently managed by the company ESAMUR. This research work was divided into two experiments. In a first experiment, water from the Roldán WWTP, was characterized and the effluent from this WWTP was used as water for irrigation of horticultural crops characteristic of the Region of Murcia (lettuce, parsley, cabbage, broccoli and zucchini). The behaviour and response of horticultural crops irrigated with the regenerated water of this WWTP were investigated, verifying the possible accumulation of the selected ECs (CBZ, DCF, IBP, KTP and NPX) in the different parts of the studied crops and evaluating the potential risk to human health its incorporation into the food chain. In a second experiment, three lettuce varieties were chosen and were irrigated with water mixed with two CEs (CBZ and DCF) at different concentrations. The accumulation of the ECs in the

edible part of the leaves and the subsequent step to the chain was studied. With the results obtained in this second experiment, the two simulation models SEI and NPUM were calibrated to predict the assimilation and distribution of the CEs in the different parts of the studied crops. The results obtained in the first experiment showed only presence of IBP in the edible part of the lettuce, not finding accumulation of the rest of CEs (CBZ, DCF, KTP and NPX) in the studied cultures. In the second experiment in the case of the CBZ, the leaves showed higher levels of uptake and higher bioconcentration factors (BCF) compared to the roots, this is due to the neutrality and the average hydrophobicity of the drug. With DCF, it was the roots that showed highest uptake levels and highest bioconcentration factors (BCF), which was attributed to their high hydrophobicity and low water solubility. The results of this experiment corresponded to the values obtained by the two simulation models SEI and NPUM. A prediction with the two simulation models SEI and NPUM of the accumulation and concentration of CBZ and DCF in lettuce was made in the assumption that effluents of 10 WWTP of the Region of Murcia were used as irrigation water. With the NPUM simulation model, a prediction of the accumulation of IBP, KTP and NPX in the lettuce culture at different concentrations of those CEs was also made. Both in the experiments carried out in the greenhouse and in the predictions developed by the two simulation models SEI and NPUM, we can observe that the daily ingested concentrations of CEs are lower than the acceptable limits. Therefore, according to the evaluation made, the concentration of CEs detected in the edible part of the lettuce, do not pose any risk to human health.

In addition, and thanks to having obtained a good simulation with the two proposed models predict the absorption and distribution of the CEs in the different parts of the studied crops, these tools are very useful to be able to save lab costs in analytics, personnel, planning and time that they involve when studies of this magnitude are required.

Keywords: emerging pollutants (CE), Wastewater Treatment Plants (WWTP), crops, absorption, simulation models, effluents, irrigation.

"El experimentador que no sabe lo que está buscando, no comprenderá lo que encuentra"
Claude Bernard (1813-1878)

ÍNDICE GENERAL

SIGLAS Y ABREVIATURAS	21
ÍNDICE DE FIGURAS, DE TABLAS Y DE ANEXOS	23
I - INTRODUCCIÓN	37
1.1. IMPORTANCIA DE LA INVESTIGACIÓN.....	37
II - JUSTIFICACIÓN	43
III – ESTADO DEL ARTE	47
3.1. Importancia del empleo de aguas residuales en la agricultura	47
3.2. El aprovechamiento de aguas residuales en el mundo.	48
3.2.1. África.....	48
3.2.2. Asia.....	49
3.2.3. Centroamérica y sudamérica.	49
3.2.4. Europa.....	50
3.2.5. Oceanía.	51
3.2.6. Oriente Medio.....	51
3.2.7. Norteamérica.	52
3.3. Importancia del aprovechamiento de las aguas residuales en la Región de Murcia.....	53
IV - OBJETIVOS	57
4.1. OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN.....	57
V - MATERIAL Y MÉTODO.....	61
5.1. SELECCIÓN DE CEs PARA EL ESTUDIO	61
5.2. DISEÑO DE CAMPO.....	63
5.3. DISEÑO EXPERIMENTAL EN EL INVERNADERO.....	66
5.3.1. Primer experimento de cultivos hidropónicos.....	66
5.3.2. Segundo experimento de cultivos hidropónicos.....	78
5.4. RECOLECCIÓN Y ANÁLISIS DE MUESTRAS.....	86
5.4.1. Extracción y análisis con el UPLC.....	86

5.4.2. Control de calidad.....	91
5.5. ANÁLISIS ESTADÍSTICO.....	91
5.6. CALIBRACIÓN Y PREDICCIÓN CON MODELOS DE REDES NEURONALES.....	92
5.6.1. Sistema experto inteligente basado en redes neuronales.....	92
5.6.2. Predicción de absorción de CBZ y DCF realizados en un modelo de simulación SEI basado en redes neuronales.....	93
5.6.3. Calibración del modelo de simulación SEI basado en redes neuronales.....	98
5.7. CALIBRACIÓN Y PREDICCIÓN CON EL MODELO DE SIMULACIÓN NPUM.....	104
5.7.1. Explicación del sistema de absorción de compuestos en las plantas.....	104
5.7.2. Modelo de simulación NPUM.....	106
5.7.3. Absorción de compuestos orgánicos en las raíces.....	108
5.7.4. Absorción de compuestos orgánicos en las brotes.....	110
5.7.5. Absorción de compuestos orgánicos en las hojas.....	113
5.7.6. Intercambio de compuestos entre las hojas y el aire.....	114
5.7.7. Preparación de los datos de entrada en el modelo de simulación NPUM.....	118
5.7.8. Parametrización y valores de entrada en el modelo de simulación NPUM.....	119
5.7.9. Calibración en la predicción de absorción de CBZ y DCF realizados con el modelo de simulación NPUM.....	123
5.7.10. Calibración en la predicción de absorción de KTP y NPX realizados con el modelo de simulación NPUM.....	125
5.7.11. Predicción de absorción de IBP, KTP y NPX realizados con el modelo de simulación NPUM.....	127
VI – RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	131
6.1. RESULTADOS DE LOS EXPERIMENTOS REALIZADOS EN INVERNADERO.....	132
6.1.1. Resultado del primer experimento en cultivo hidropónico.....	132
6.1.2. Resultado del segundo experimento en cultivo hidropónico.....	135
6.2 RESULTADOS DE LOS MODELOS DE PREDICCIÓN CALIBRADOS.....	150
6.2.1. Comparativa entre los resultados del segundo experimento y la predicción de absorción de CBZ y DCF realizada con los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	150

6.2.2. Resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF realizados con el modelo de simulación SEI en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	159
6.2.3. Resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF en las EDAR realizados con el modelo de simulación NPUM en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	172
6.2.4. Comparativa entre los resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF realizados en un modelo basado en las modelos de simulación SEI y NPUM en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	184
6.2.5. Predicción de absorción de IBP, KTP y NPX mezclada con el agua de riego a diferentes concentraciones realizados con el modelo de simulación NPUM	195
6.2.6. Predicción de absorción de KTP y NPX realizados con el modelo de simulación NPUM en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	206
VII CONCLUSIONES.....	217
VIII –LIMITACIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN	223
IX –REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	227
X –ANEXOS.....	245

SIGLAS Y ABREVIATURAS

AL: Depuradora de Alcantarilla

BCF: Factor de Bioconcentración

CB: Depuradora de Cabezo Beaza - Cartagena

CBZ: Carbamazepina

CC: Depuradora de Caravaca de la Cruz

CEBAS: Centro de Edafología y Biología Aplicada del Segura

CEs: Contaminantes Emergentes

Ci: Depuradora de Cieza

CO₂: Dióxido de Carbono

CSIC: Consejo Superior de Investigaciones Científicas

DCF: Diclofenaco

DTU: Technical University of Denmark

EDAR: Estaciones Depuradoras de Aguas Residuales

ELM: Máquina de aprendizaje extremo

FFNNs: Redes neuronales

IBP: Ibuprofeno

KTP: Ketoprofeno

LARS: Algoritmo de regresión de ángulo mínimo

LH: Depuradora de La Hoya - Lorca

LOD: Límite de detección

K_{AW}: coeficiente de partición entre aire y agua

K_{OA}: coeficiente de partición entre n-octanol y aire

K_{OW}: coeficiente de partición entre n-octanol y agua

LOQ: Límite de cuantificación

ME: Depuradora de Murcia Este

MLP: perceptrón multicapa

MN: Depuradora de Molina de Segura

NPUM: New Plant Uptake model for ionizable compounds 2 x 2 matrix

NPX: Naproxeno

OP-ELM: Máquina de aprendizaje extremo optimizada

PE: Población equivalente

PL: Depuradora de Puerto Lumbreras

RCF: Factor de concentración de raíz

SEI: Sistema Experto Inteligente

SJ: Depuradora de San Javier

SLFN: algoritmo eficiente para una sola capa oculta

TSCF: Factor de concentración de la corriente de transpiración

UDA: Unidades de demanda agraria

UPLC: UPLC Acquity I-Class System de Waters

UTM: Universal Transverse Mercator

Y: Depuradora de Yecla

ÍNDICE DE FIGURAS, DE TABLAS Y DE ANEXOS

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Fuentes y rutas de incorporación de CEs en el medio ambiente.....	38
Figura 2. Ciclo de incorporación de CEs a la cadena alimentaria tras el proceso de depuración.....	39
Figura 3. Proceso de traslocación de los CEs hasta la parte comestible de las lechugas.....	62
Figura 4. Localización de la EDAR y la Parcela experimental ubicada en las instalaciones de la planta Roldán-Balsicas, Lo Ferro. Murcia, (España).....	64
Figura 5. Aprovechamiento esquemático del agua regenerada en la EDAR de Roldán-Balsicas (Murcia).....	64
Figura 6. Características técnicas de la EDAR de Roldán-Balsicas (Murcia).....	65
Figura 7. Vista de las instalaciones de la EDAR de Roldán-Balsicas (Murcia).....	65
Figura 8. Vista exterior del invernadero anexo a la EDAR de Roldán-Balsicas donde se han realizado los experimentos.....	66
Figura 9. Vista exterior de la EDAR de Roldán-Balsicas y de los invernaderos.....	67
Figura 10. Esquema del experimento del aprovechamiento del efluente procedente de la EDAR como agua de riego en los cultivos estudiados.....	69
Figura 11. Foto detalle de las bolsas de sustrato de fibra de coco.....	70
Figura 12. Vista general en el interior del invernadero con los cultivos hidropónicos donde se han realizado los experimentos.....	72
Figura 13. Vista de detalle del interior del invernadero con el cultivo hidropónico.....	73
Figura 14. Vista en el interior del invernadero del resto de los cultivos estudiados.....	74
Figura 15. Vista de la distribución espacial de los cultivos en la parcela 1 en el interior del invernadero.....	75
Figura 16. Vista de la distribución espacial de los cultivos en la parcela 2 en el interior del invernadero.....	76
Figura 17. Vista de la distribución espacial de los cultivos en la parcela 3 en el interior del invernadero.....	77

Figura 18. Diseño del experimento para estudiar la absorción de CEs hasta la parte comestible de las lechugas.....	79
Figura 19. Esquema del aprovechamiento del efluente procedente de la EDAR como agua de riego mezclada con CBZ y DCF a diferentes concentraciones.....	80
Figura 20. Vista de la distribución espacial de las tres variedades de lechuga en la parcela 1 en el interior del invernadero.....	81
Figura 21. Vista interior del invernadero con las unidades de experimentación de lechugas.....	82
Figura 22. Distribución interior del invernadero de las tres variedades de lechugas.....	82
Figura 23. Gráfica de la evolución de la dosis acumulada de la mezcla de CEs aportada en el agua de riego según la semana del ciclo vegetativo del cultivo.....	85
Figura 24. Detalle de la forma de las raíces del cultivo en el momento de retirar la bolsa del sustrato de fibra de coco.....	86
Figura 25. Detalle de las raíces de una planta de lechuga en el sustrato de fibra de coco...87	87
Figura 26. Detalle de la recolección de las muestras vegetales para su posterior análisis...88	88
Figura 27. Pretratamiento en la extracción del tejido vegetal.....	89
Figura 28. Metodología y equipos utilizados en la extracción del tejido vegetal.....	90
Figura 29. Esquema de diseño de la predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechuga en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia con el modelo NPUM.....	94
Figura 30. Mapa de la distribución geográfica de CBZ en los efluentes de las EDAR estudiadas en la Región de Murcia.....	96
Figura 31. Mapa de la distribución geográfica de DCF en los efluentes de las EDAR estudiadas en la Región de Murcia.....	97
Figura 32. Diagrama de las calibraciones de las representaciones gráficas de las predicciones obtenidas para la acumulación de CBZ en las hojas y raíces de las lechugas.....	103
Figura 33. Diagrama de las calibraciones de las representaciones gráficas de las predicciones obtenidas para la acumulación de DCF en las hojas y raíces de las lechugas.....	103
Figura 34. Procesos de absorción y transporte en la planta.....	105
Figura 35. Principio del modelo de predicción de absorción de compuestos químicos NPUM.....	106
Figura 36. Relación entre la absorción de productos químicos por las raíces de las plantas (expresado como RCF) y sus coeficientes de partición entre octanol y agua (Log K _{ow})....	108

Figura 37. Sección transversal de raíz que muestra las posibles rutas de agua y movimiento de solutos en el interior de la planta.....	110
Figura 38. Comparación de TSCF empírico y calculado.....	112
Figura 39. Red de resistencias encontradas por las moléculas orgánicas que se difunden desde el entorno al sitio objetivo dentro del mesófilo.....	113
Figura 40. Representación esquemática de resistencias entre hoja y aire.....	115
Figura 41. Datos de entrada de las características químicas del CE en el modelo de simulación NPUM.....	120
Figura 42. Datos de entrada de las características de los cultivos (hojas y raíces) en el modelo de simulación NPUM.....	120
Figura 43. Coeficientes de partición y modelos de celda en el modelo de simulación NPUM.....	121
Figura 44. Vista de los cálculos realizados por el modelo de simulación NPUM.....	121
Figura 45. Vista de los cálculos realizados por el modelo de simulación NPUM.....	122
Figura 46. Esquema de diseño de la predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechuga en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia con el modelo NPUM.....	123
Figura 47. Esquema de diseño de la predicción de acumulación de KTP y NPX en lechuga en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia con el modelo NPUM.....	125
Figura 48. Esquema de diseño de la predicción de acumulación de IBP, KTP y NPX en lechuga a diferentes concentraciones con el modelo NPUM.....	127
Figura 49. Concentraciones de los CEs (ng l ⁻¹) en el influente y en el efluente de la EDAR utilizada como riego en los vegetales cultivados dentro del invernadero.....	132
Figura 50. Gráfica del consumo diario estimado en hojas de lechuga de IBP y el consumo diario aceptable.....	134
Figura 51. Concentraciones de CBZ (ng g ⁻¹) en las hojas de las tres variedades de lechugas regadas con agua mezclada con CBZ a diferentes concentraciones.....	136
Figura 52. Concentraciones de CBZ (ng g ⁻¹) en las raíces de las tres variedades de lechugas regadas con agua mezclada con CBZ a diferentes concentraciones.....	137
Figura 53. Concentraciones de DCF (ng g ⁻¹) en las hojas de las tres variedades de lechugas regadas con agua mezclada con DCF a diferentes concentraciones.....	139
Figura 54. Concentraciones de DCF (ng g ⁻¹) en las hojas de las tres variedades de lechugas regadas con agua mezclada con DCF a diferentes concentraciones.....	139
Figura 55. Factor de bioconcentración de CBZ y DCF en hojas.....	143
Figura 56. Factor de bioconcentración de CBZ y DCF en raíces.....	144

Figura 57. Relaciones de concentración de hoja / raíz en CBZ ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$).....	146
Figura 58. Relaciones de concentración de hoja / raíz en DCF ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$).....	146
Figura 59. Comparativa de predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechugas entre los dos modelos de simulación SEI y NPUM a diferentes concentraciones.....	150
Figura 60. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las hojas de la lechuga Iceberg var. Gitana, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	151
Figura 61. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las raíces de la lechuga Iceberg var. Gitana, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	152
Figura 62. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las hojas de la lechuga Mini Romana var. Jibera, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	152
Figura 63. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las raíces de la lechuga Mini Romana var. Jibera, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	153
Figura 64. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las hojas de la lechuga Hoja de Roble var. Kiprien, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	153
Figura 65. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las raíces de la lechuga Hoja de Roble var. Kiprien, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	154
Figura 66. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las hojas de la lechuga Iceberg var. Gitana, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	155
Figura 67. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las raíces de la lechuga Iceberg var. Gitana, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	156
Figura 68. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las hojas de la lechuga Mini Romana var. Jibera, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	156
Figura 69. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las raíces de la lechuga Mini Romana var. Jibera, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	157

Figura 70. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las hojas de la lechuga Hoja de Roble var. Kiprien, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	157
Figura 71. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las raíces de la lechuga Hoja de Roble var. Kiprien, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM.....	158
Figura 72. Predicción de acumulación de CEs en lechugas a partir de un modelo de simulación SEI.....	159
Figura 73. Mapa de predicción de la concentración de CBZ en las hojas de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia.....	161
Figura 74. Mapa de predicción de la concentración de CBZ en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia.....	162
Figura 75. Mapa de predicción de la concentración de DCF en las hojas de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia.....	163
Figura 76. Mapa de predicción de la concentración de DCF en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia.....	165
Figura 77. Relaciones de concentración de hoja / raíz en CBZ ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$).....	168
Figura 78. Predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechugas a partir del modelo de simulación NPUM.....	172
Figura 79. Mapa de predicción de la concentración de CBZ en las hojas de las lechugas de las EDAR de la Región de Murcia.....	173
Figura 80. Mapa de predicción de la concentración de CBZ en las raíces de las lechugas de las EDAR de la Región de Murcia.....	174
Figura 81. Mapa de predicción de la concentración de DCF en las hojas de las lechugas de las EDAR de la Región de Murcia.....	175
Figura 82. Mapa de predicción de la concentración de DCF en las raíces de las lechugas de las EDAR de la Región de Murcia.....	176
Figura 83. Relaciones de concentración de hoja / raíz en CBZ ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$).....	180
Figura 84. Comparativa de predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechugas entre los modelos de simulación SEI y NPUM en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	184
Figura 85. Gráfica comparativa de la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de CBZ en las hojas de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia.....	185

Figura 86. Gráfica comparativa de la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de CBZ en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia.....	186
Figura 87. Gráfica comparativa de la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de DCF en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia.....	187
Figura 88. Gráfica comparativa de los BCFs basados en la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de CBZ en las hojas de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia.....	188
Figura 89. Gráfica comparativa de los BCFs basados en la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de CBZ en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia.....	189
Figura 90. Gráfica comparativa de los BCFs basados en la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de DCF en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia.....	189
Figura 91. Gráfica comparativa de las relaciones de concentración de hoja / raíz en CBZ (Choja / Craíz) obtenidas con los resultados de los dos modelos de predicción en las EDAR estudiadas de la Región de Murcia.....	190
Figura 92. Gráfica comparativa del consumo diario estimado en hojas de CBZ obtenidas con los resultados de los dos modelos de predicción en las EDAR estudiadas de la Región de Murcia y el consumo diario aceptable.....	192
Figura 93. Gráfica comparativa del consumo diario estimado en raíces de DCF obtenidas con los resultados de los dos modelos de predicción en las EDAR estudiadas de la Región de Murcia y el consumo diario aceptable.....	193
Figura 94. Predicción de absorción de IBP, KTP y NPX en lechugas con el modelo de simulación NPUM.....	195
Figura 95. Gráfica comparativa de la concentración de IBP en las hojas de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM.....	196
Figura 96. Gráfica comparativa de la concentración de IBP en las raíces de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM.....	197

Figura 97. Gráfica comparativa de la concentración de KTP en las hojas de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM.....	198
Figura 98. Gráfica comparativa de la concentración de KTP en las raíces de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM.....	199
Figura 99. Gráfica comparativa de la concentración de NPX en las hojas de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM.....	200
Figura 100. Gráfica comparativa de la concentración de NPX en las raíces de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM.....	200
Figura 101. Factor de bioconcentración de IBP, KTP y NPX en hojas.....	201
Figura 102. Factor de bioconcentración de IBP, KTP y NPX en raíces.....	202
Figura 103. Relaciones de concentración de hoja / raíz en IBP, KTP y NPX (Choja / Craíz).....	203
Figura 104. Predicción de acumulación de KTP y NPX en lechugas a partir del modelo de simulación NPUM.....	206
Figura 105. Mapa de predicción de la concentración de KTP en las hojas de las lechugas en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	207
Figura 106. Mapa de predicción de la concentración de KTP en las raíces de las lechugas en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	208
Figura 107. Mapa de predicción de la concentración de NPX en las hojas de las lechugas en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	209
Figura 108. Mapa de predicción de la concentración de NPX en las raíces de las lechugas en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	210
Figura 109. Gráfica comparativa de las relaciones de concentración de hoja / raíz en KTP y NPX ($C_{hoja} / C_{raíz}$) obtenidas con los resultados del modelo de simulación NPUM en las 10 EDAR estudiadas de la Región de Murcia.....	212

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Tabla con los parámetros que influyen en la absorción de los CE en diferentes estudios realizados previamente.....	62
Tabla 2. Tabla de las propiedades fisicoquímicas de los CE estudiados.....	63
Tabla 3. Tabla con los cultivos y los diferentes tejidos analizados.....	68
Tabla 4. Concentración de los CE estudiados en el efluente de la EDAR.....	68
Tabla 5. Composición de la solución nutritiva aplicada a los vegetales.....	69
Tabla 6. Propiedades fisicoquímicas del sustrato de fibra de coco.....	71
Tabla 7. Planificación de la dosis de CE aplicada por unidad experimental y variedad.....	84
Tabla 8. Tabla de concentraciones medias ($\mu\text{g L}^{-1}$) de los CE en los efluentes de la EDAR objeto de estudio.....	95
Tabla 9. Tabla de la población servida y la población equivalente en las EDAR objeto de estudio.....	97
Tabla 10. Calibración para DCF usando dos entradas en el modelo de simulación SEI.....	99
Tabla 11. Calibración para CBZ usando dos entradas en el modelo de simulación SEI.....	100
Tabla 12. Calibración para DCF usando una entrada en el modelo de simulación SEI.....	100
Tabla 13. Calibración para CBZ usando una entrada en el modelo de simulación SEI.....	101
Tabla 14. Calibración para CBZ utilizando núcleos gaussianos y sigmoideos.....	102
Tabla 15. Calibración para DCF utilizando núcleos gaussianos y sigmoideos.....	102
Tabla 16. Parámetros de entrada en el modelo NPUM en vegetales de hoja normalizados en 1 m^2	118
Tabla 17. Tabla de concentraciones medias ($\mu\text{g L}^{-1}$) de los CE en los efluentes de las EDAR estudiadas.....	126
Tabla 18. Tabla de la ingestión estimada de CE en el consumo de lechugas regadas con agua mezclada con CE a diferentes concentraciones.....	149
Tabla 19. Tabla de predicción de concentración de CBZ en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia.....	160
Tabla 20. Tabla de predicción de concentración de DCF en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia.....	164
Tabla 21. Tabla resumen de BCFs en hojas de CBZ y DCF.....	166
Tabla 22. Tabla resumen de BCFs en raíces de CBZ y DCF.....	167
Tabla 23. Tabla de la ingestión estimada de CBZ en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas.....	170

Tabla 24. Tabla de la ingestión estimada de DCF en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas.....	171
Tabla 25. Tabla resumen de BCFs en hojas de CBZ y DCF en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	177
Tabla 26. Tabla resumen de BCFs en raíces de CBZ y DCF en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.....	178
Tabla 27. Tabla de la ingestión estimada de CBZ en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas según las predicciones del modelo NPUM.....	182
Tabla 28. Tabla de la ingestión estimada de CBZ en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas según las predicciones del modelo NPUM.....	183
Tabla 29. Tabla de la ingestión estimada de IBP, KTP y NPX en el consumo de lechuga variedad Mini Romana regada con agua mezclada con CEs a diferentes concentraciones.....	205
Tabla 30. Tabla resumen de BCFs en hojas de KTP y NPX.....	211
Tabla 31. Tabla resumen de BCFs en raíces de KTP y NPX.....	211
Tabla 32. Tabla de la ingestión estimada de KTP en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas.....	213
Tabla 33. Tabla de la ingestión estimada de NPX en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas.....	214

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO I: DATOS DEL PRIMER EXPERIMENTO.....	245
ANEXO II: DATOS DEL SEGUNDO EXPERIMENTO.....	247
ANEXO III: LISTADOS DE CÁLCULO DE PROGRAMA NEW PLANT UPTAKE MODEL FOR IONIZABLE COMPOUNDS 2 X 2 MATRIX. MONVALENT ACIDS AND BASES.....	251
ANEXO IV: COEFICIENTES DE CORRELACIÓN ENTRE EL SEGUNDO EXPERIMENTO Y LOS MODELOS DE PREDICCIÓN UTILIZADOS.....	331

I - INTRODUCCIÓN

I - INTRODUCCIÓN

1.1. IMPORTANCIA DE LA INVESTIGACIÓN

El agua es un recurso escaso y es imprescindible para el medio ambiente y para la vida humana. Como consecuencia del rápido desarrollo económico se ha realizado un uso indebido de la misma. Durante muchos años, han sido vertidos al medio ambiente, sustancias biológicamente activas, residuos de agricultura, la industria y la medicina.

La calidad del agua es un problema en todas las partes del mundo, tanto en los países desarrollados como en los que están en vías de desarrollo. Esto hace que depende en que parte del mundo nos encontremos, la preocupación de la calidad del agua dependa de factores totalmente diferentes entre sí.

El deterioro de la calidad del agua es una amenaza para los progresos conseguidos en el acceso al agua potable. El manejo y el almacenamiento en condiciones no óptimas constituyen un problema. La contaminación química del agua es un grave problema. La contaminación de las aguas se debe a vertidos de muy diferente índole, sustancias industriales, pesticidas, hidrocarburos, ...

Pero en la sociedad actual en que vivimos, nos encontramos con nuevos compuestos como son los contaminantes emergentes (CEs) en las aguas que en países como España tienen una amplia presencia. Dentro de los CEs encontramos los fármacos y los productos de uso personal y esta contaminación se suma a la que tradicionalmente ha sido más estudiada y vinculada a determinadas sustancias industriales, pesticidas, etc. Esto se debe a que una parte de los CEs que son ingeridos acaban en los ríos a través de la orina debido a que el ser humano no es capaz de metabolizar los CEs al 100% y los excreta por las heces y la orina (Lienert et al., 2007).

La aparición de elementos tóxicos tiene su origen en el ciclo del agua y en alguna parte de este ciclo es donde se produce la contaminación del agua, alterando su calidad. Las principales vías de entrada de los contaminantes en el medio ambiente son urbanas, industriales, agrícola y ganadero (Figura 1).

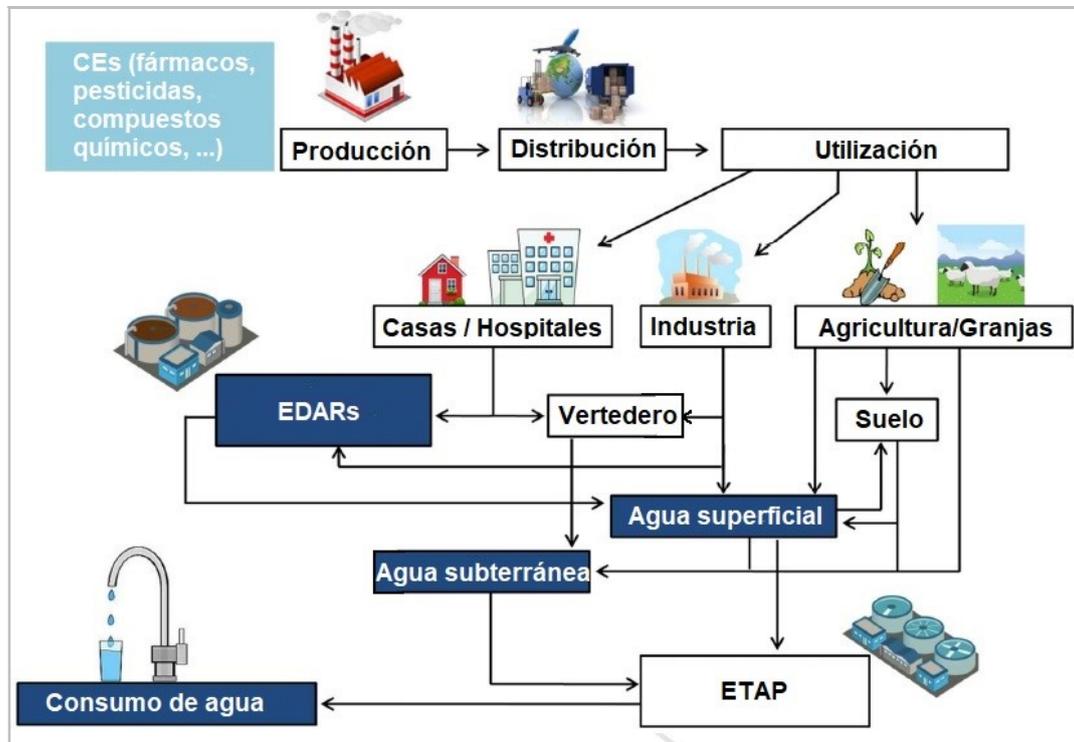


Figura 1. Fuentes y rutas de incorporación de CEs en el medio ambiente. Fuente adaptado de Barbosa et al., 2016

Debido a que las Estaciones Depuradoras de Aguas Residuales (EDAR) no están diseñadas para la eliminación de contaminantes emergentes (Camacho-Muñoz et al., 2009), en los puntos de vertido de las EDAR, encontramos concentraciones considerables de estos nuevos contaminantes. Esto es debido a su persistencia al tratamiento secundario convencional (por ejemplo, lodos), estos productos químicos no se eliminan por completo. (Halling-Sørensen et al., 1998; Ternes, 1998). La Unión Europea (UE) considera actualmente que el costo de las estrategias de control de estos contaminantes (por ejemplo, la actualización de las EDAR existentes) no compensa los impactos asociados a tales contaminantes (Plósz et al., 2013). Cuando se aprovechan los efluentes de las EDAR como agua de riego en cultivos, se incorporan los CEs en la cadena alimentaria cuando los vegetales que se consumen por el ser humano tienen una concentración de CEs en las partes comestibles de los mismos. Al ser consumidas por el ser humano, parte de estos CEs son expulsados por la orina y se vierten a las EDAR. Por su parte las EDAR no eliminan por completo los CEs y se incorporan de nuevo a los vegetales que son regados con el agua del efluente de la EDAR (Figura 2).

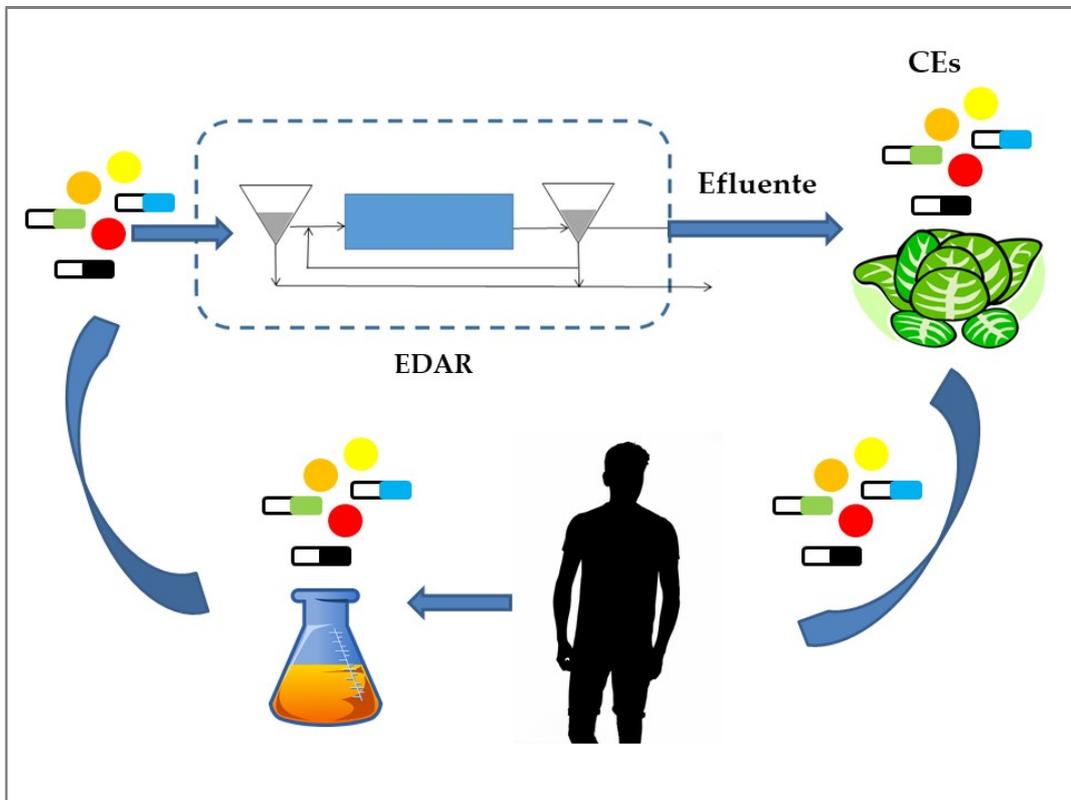


Figura 2. Ciclo de incorporación de CE a la cadena alimentaria tras el proceso de depuración. Fuente elaboración propia

Entre los diferentes CE que podemos encontrar en los efluentes de las EDAR se han detectado: los betabloqueantes, analgésicos, reguladores lipídicos, antibióticos, medios de contrastes de Rayos X, etc. (Flyborg et al., 2010; Hörsing et al., 2011; Kasprzyk-Hordern et al., 2007; Miega et al., 2008; Radjenovic et al., 2007; Rosal et al., 2010;). Según estudios realizados, en los ríos europeos se ha detectado niveles de CE en los siguientes porcentajes: CBZ en un 95%, DCF en un 83%, NPX en un 69%, IBP en un 62% y KTP en un 14% siendo las mayores concentraciones medias para CBZ ($75,00 \text{ ng L}^{-1}$) (Loos et al., 2009).

II - JUSTIFICACIÓN

II - JUSTIFICACIÓN

El trabajo recogido en esta Tesis Doctoral se presenta como un estudio fundamental en el aprovechamiento de las aguas regeneradas procedentes de EDAR como agua de riego en cultivos hortícolas en zonas donde la escasez de agua es un factor limitante en el riego de estos cultivos como acontece en la zona de estudio de este trabajo de la Región de Murcia.

Los conocimientos de otros trabajos de investigación realizados sobre este tema han servido de punto de partida para poder seguir avanzando en el estudio del comportamiento de los CE's en las diferentes partes de la planta después de la absorción y acumulación de los mismos en los cultivos.

El empleo de modelos de predicción de absorción de CE's en los tejidos de las plantas como los expuestos en esta Tesis Doctoral, son de gran ayuda en la toma de decisiones en el aprovechamiento de las aguas regeneradas y contribuyen a reducir costes de laboratorio, impacto ambiental y tiempos de espera en la obtención de resultados de concentración de CE's en los tejidos de las plantas y poder estudiar los riesgos asociados que esta práctica puede suponer en la salud humana.

Tras lo expuesto, se considera que profundizar en el aprovechamiento de las aguas procedentes de EDAR, la presencia de CE's en los efluentes y la absorción de los diferentes CE's en los cultivos que se han regado con dichas aguas, tiene un alto interés para favorecer la toma de decisiones más juiciosas en relación al aprovechamiento de aguas procedentes de EDAR en el riego de cultivos sin que esta práctica suponga un riesgo para la salud humana debido a la incorporación de CE's en la cadena alimentaria al consumir dichos cultivos.

III – ESTADO DEL ARTE

III – ESTADO DEL ARTE

3.1. IMPORTANCIA DEL EMPLEO DE AGUAS RESIDUALES EN LA AGRICULTURA.

Se estima que en el año 2030 un porcentaje mayor del 60% de la población mundial podría sufrir escasez de agua (Qadir et al., 2007; Rijsberman, 2006; Wallace, 2000). Los recursos de agua renovable han disminuido en todas las regiones del mundo con excepción de Europa del Este (Redondo y Lomax, 1997). Además, las necesidades de agua para la producción de alimentos aumentarán significativamente para erradicar la pobreza en los países en desarrollo a partir del año 2040.

Para satisfacer estas necesidades de agua de riego, el uso del agua subterránea está aumentando debido a diversos factores como el cambio climático, el aumento de la población y el consumo excesivo de agua (Doll et al., 2012; Green et al., 2011; Siebert et al., 2010), lo que conlleva a una sobreexplotación de los recursos del agua subterránea. Debido a estos factores expuestos, las aguas residuales pueden ayudar a solventar estas necesidades de agua de riego y reducir la presión sobre los recursos hídricos convencionales. Pero para que estas aguas residuales puedan llegar a utilizarse, deben tratarse para cumplir con unos estándares de calidad del agua de riego (WHO, 2006).

El bienestar social y la protección del medio ambiente impulsan el uso de aguas residuales como agua de riego en la agricultura dado los beneficios que aporta como el aumento de la producción, un mayor suministro de alimentos y la disminución de la malnutrición en los países pobres. Este aprovechamiento de agua residual contribuye a la protección del medio ambiente (Anderson, 2003; Hamilton et al., 2006), minimizando los impactos ambientales asociados con la extracción de aguas subterráneas y reduciendo el vertido de las aguas residuales al medio ambiente.

A pesar de que el aprovechamiento de las aguas residuales puede ayudar a alcanzar los beneficios anteriormente descritos, también puede ser perjudicial debido a la degradación de los suelos agrícolas y la contaminación de los acuíferos y las aguas superficiales. Por tanto, el empleo de aguas residuales se enfrenta a los siguientes desafíos: (i) las aguas residuales son un recurso de gran importancia mundial sobretodo en la agricultura; (ii) el uso de las aguas residuales con una adecuada gestión contribuye a

mantener la producción de alimentos sin ningún riesgo para la salud humana respetando el medio ambiente; y (iii) sin una gestión adecuada, el uso de aguas residuales plantea graves riesgos para la salud humana y el medio ambiente.

3.2. EL APROVECHAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES EN EL MUNDO.

3.2.1. África.

En el norte de África, Túnez es el pionero en el aprovechamiento de las aguas residuales como agua de riego (Shetty, 2004). Aproximadamente un 75 y un 25% de las poblaciones urbanas y rurales respectivamente, están conectadas al alcantarillado lo que ha permitido la puesta en marcha de la reutilización de las aguas residuales (Ministry of Agriculture, 1998) con una reutilización agrícola de 25.000 has con aproximadamente 300 millones de m³ de aguas residuales tratadas en la actualidad (Ministry of Agriculture, 1998).

En el caso de Egipto, la reutilización de aguas residuales tratadas no está permitida en el uso de riego de verduras que se consuman crudas. En Marruecos se riegan aproximadamente 8.000 has de terreno con aguas residuales (USEPA, 2004) y uno de los mayores problemas que plantea para su reutilización eficiente es unas adecuadas infraestructuras (USEPA, 2004).

El África subsahariana está caracterizado por economías pobres con deficientes redes de alcantarillado y riego que impiden la reutilización de las aguas residuales con unas mínimas garantías sanitarias. En zonas agrícolas de Ghana aproximadamente un 40% de los agricultores extraen el agua de riego de ríos, la mayor parte de los cuales están contaminados con aguas residuales sin tratar (Cornish y Aidoo, 2000; Cornish et al., 2001). En Dakar una práctica común es el aprovechamiento del agua directamente de las alcantarillas para obtener agua para el riego de cultivos hortícolas (Faruqui et al., 2004). Por último, destacar que Sudáfrica posee una infraestructura de alcantarillado bien desarrollada pero solo reutiliza menos de un 5% del efluente tratado (Grobicki, 2000).

3.2.2. Asia.

La reutilización de aguas residuales es una práctica muy común en Asia.

China tiene una distribución desigual del agua al tener un 80% del total de los recursos de agua ubicados en el sureste (Worldwatch Institute, 2006) en una región que representa solo el 35% de la tierra cultivable del país (Deng et al., 2006; Wang et al., 1999). Teniendo en cuenta estas características, la disponibilidad de los recursos hídricos per cápita es inferior a un tercio de la media mundial (Wang y Jin, 2006).

Con el fin de dar solución a esta situación, se ha desarrollado un modelo de optimización diseñado por Chu et al. (2004), con el que se puede llegar a calcular el volumen anual de reutilización de aguas residuales en China, teniendo en cuenta las limitaciones tecnológicas, físicas y económicas. Con este modelo, en Beijing se podrían llegar a reutilizar medio billón de m³ al año. Con este modelo de aprovechamiento planteado, el potencial estimado de reutilización de aguas residuales se ha incrementado a 2,50 billones m³ año⁻¹. La agricultura es el sector con mayor demanda de aguas residuales, donde las aguas residuales que se utilizan para el riego en China son en su mayoría no tratadas y de mala calidad. Destaca también Japón como referente en la reutilización de aguas residuales urbanas, donde la agricultura representa aproximadamente un 15% de la reutilización total de aguas residuales y el resto se utiliza en el riego de parques, campos de golf, ...) (Japan Sewage Works Association, 2002; Ogoshi et al., 2001).

En los países en desarrollo de Asia tropical, el riego de aguas residuales no es frecuente debido a la alta precipitación anual, exceptuando países como la India y Vietnam que si que utilizan las aguas residuales (Radcliffe, 2004).

En Pakistán, en el 80% de las ciudades con poblaciones mayores de 10.000 habitantes usan aguas residuales no tratadas para regar tierras agrícolas (Ensink et al., 2004).

3.2.3. Centroamérica y sudamérica.

El aprovechamiento de las aguas residuales cada vez está adquiriendo mayor importancia a pesar de los abundantes recursos hídricos disponibles en esta parte del mundo debido a diferentes condicionantes como por ejemplo la ubicación y el tamaño de muchas de las grandes ciudades que hace que la disponibilidad del agua no sea tan abundante o accesible como cabría esperar. En Brasil, por ejemplo, cuenta con aproximadamente el 7% del agua del mundo pero el 80% se encuentra en el norte,

mientras que aproximadamente el 70% de la población habita en las zonas sureste, sur y oeste central del país (USEPA, 2004). El principal uso del agua regenerada en Brasil se dedica principalmente a las aplicaciones industriales, como torres de enfriamiento en la planta de fabricación de vehículos, Aeropuerto Internacional de São Paulo, ... (Wagner, 2006). En Perú, la reutilización de aguas residuales se practica en la zona costera donde la mayoría del efluente no tratado se utiliza en el riego de cultivos agrícolas (USEPA, 2004). En Lima se aprovechan las aguas residuales no tratadas en el riego agrícola.

3.2.4. Europa.

En Europa aproximadamente la mitad de los países están en una situación donde la disponibilidad de agua se está convirtiendo en una limitación para el desarrollo de los mismos y se requieren grandes inversiones para asegurar el suministro de agua (Bixio et al., 2005). Además, existen desequilibrios entre los recursos y la demanda de agua que surgen debido a diferentes factores como la inestabilidad en las precipitaciones, el tamaño de la población y el creciente nivel de vida en muchos países. Se han realizado importantes proyectos de reutilización de aguas residuales en Europa (Bixio et al., 2005), principalmente en las zonas costeras del sur de Europa (45% riego agrícola) con una climatología más seca y en zonas urbanas (50% uso industrial) con una alta densidad de población del norte de Europa. (Angelakis y Bontoux, 2001; Angelakis et al., 2003).

Suecia y Escandinavia tienen regiones secas lo que ha llevado a tomar en práctica políticas en la conservación del agua y la reutilización de aguas residuales. En los Países Bajos, debido a las restricciones en la extracción de acuíferos, ha llevado a incentivar el aprovechamiento de las aguas residuales para su posterior reutilización. En países como Alemania, Austria, Irlanda, Dinamarca, Finlandia o Luxemburgo, el riego con aguas residuales es prácticamente inexistente. En Francia y en Italia se riegan con aguas residuales tratadas más de 3.000 y 4.000 has de cultivo respectivamente (Barbaglio et al., 2001). Grecia sufre de escasez de agua y las aguas residuales se consideran una solución para solventar el déficit hídrico y en Portugal hay varios proyectos en la reutilización de aguas residuales. En España tiene gran importancia el aprovechamiento de las aguas residuales tratadas en la agricultura principalmente en zonas con déficit hídrico como veremos en el apartado 3.3.

3.2.5. Oceanía.

En las islas del Pacífico, el clima es muy húmedo y no hay una infraestructura adecuada para la reutilización de las aguas. En el caso de Australia, tiene sistemas de alcantarillado bien desarrollados y se producen aproximadamente 1800 millones de $\text{m}^3 \text{ año}^{-1}$ de efluente de los cuales se aprovecha aproximadamente el 9% (Radcliffe, 2003). Cuenta con instalaciones dedicadas a aplicaciones industriales y urbanas representando aproximadamente el 25% del volumen total reutilizado (Boland et al., 2005; Radcliffe, 2004). La mayor parte de la reutilización de las aguas en zonas urbanas es para riego de campos de golf y parques. Debido al continuo crecimiento de la industria hortícola en Australia, hace que cada vez sea más atractiva el uso de las aguas residuales en muchas zonas hortícolas que se encuentran cerca de las EDAR de las grandes ciudades (Hamilton et al., 2005).

3.2.6. Oriente Medio.

El uso de aguas residuales para el riego agrícola está muy extendido en esta parte del mundo debido a la escasez de agua en grandes poblaciones. Aproximadamente un 25% de la agricultura de Kuwait se riega con aguas residuales y en Irán se utilizan más de 65 millones de m^3 anuales de aguas residuales para el riego agrícola (Radcliffe, 2004). En algunos países como Omán solo la mitad de sus aguas residuales es sometida a tratamiento, reutilizándolo principalmente en arboricultura (FAO, 2001).

Israel es líder mundial en el riego con aguas residuales procedentes de EDAR, aprovechando más del 60% de las aguas residuales, con un alto aprovechamiento en el riego agrícola (Lawhon y Schwartz, 2006). Debido a un aumento en el tamaño de la población llevó a una balanza negativa entre la oferta y la demanda en Israel (Oron, 1998) y una de las soluciones para poder satisfacer esta demanda de agua fue recurrir al empleo de aguas residuales regeneradas en la agricultura (USEPA, 2004).

En otras zonas como Jordania, el aprovechamiento de aguas residuales regeneradas representa aproximadamente el 10% del suministro de agua (McCornick et al., 2001) en reutilización a través de lechos de arroyos secos y a través del embalse King Talal desde donde se transporta a través de canales de riego para abastecer la agricultura. (McCornick et al., 2001).

Arabia Saudí ha dependido de las aguas subterráneas (FAO, 2003), y actualmente los acuíferos subterráneos están agotándose y ante el incremento de la demanda han adoptado como solución poner en marcha los sistemas de desalinización de agua de mar que actualmente representan aproximadamente el 35% del total industrial y el 40% del total del consumo doméstico haciendo de Arabia Saudí líder mundial en desalación (FAO, 2003). Sin embargo, esta tecnología tiene un alto coste energético, promoviendo el aprovechamiento de las aguas residuales como una solución a este problema planteado.

3.2.7. Norteamérica.

En México se riegan aproximadamente 400.000 has de tierras agrícolas con aguas residuales, aunque solo recibe tratamiento el 11% de estas aguas residuales (Peasey et al., 2000). Las aguas residuales de Ciudad de México se transportan a la zona donde abastece una extensa red que permite el riego de aproximadamente 90.000 has de cultivos (Van der Hoek, 2004). En Estados Unidos, California y Florida son los estados más representativos en el riego con aguas residuales. California es el estado pionero, con reutilización para fines agrícolas y paisajísticos que datan del año 1900 aproximadamente (Recycled Water Taskforce, 2003). En 1970, se aprovecharon aproximadamente 220 millones de $\text{m}^3 \text{año}^{-1}$ de aguas residuales aumentando su aprovechamiento a 700 millones de $\text{m}^3 \text{año}^{-1}$ aproximadamente en el año 2000. (Recycled Water Taskforce, 2003). El origen de esta reutilización de las aguas regeneradas fue para la recarga de aguas subterráneas y actualmente el sector agrícola es el mayor destino de esta agua regenerada. Los estándares californianos son muy estrictos; en los que las aguas residuales para el riego de cultivos alimentarios deben someterse a tratamiento secundario, filtración y desinfección (California Department of Health Services, 2001). En el estado de Florida, se usan aproximadamente 800 millones $\text{m}^3 \text{año}^{-1}$ de aguas residuales en el riego de jardines. En estos dos estados, las aguas residuales son sometidas a un fuerte tratamiento previo para cumplir con los estrictos estándares de calidad (California Department of Health Services, 2001; Reuse Coordinating Committee and Water Reuse Work Group, 2003). En Canadá, debido a la gran disponibilidad de agua en la mayoría de las regiones, no está extendida la reutilización de las aguas residuales (Marsalek et al., 2002).

3.3. IMPORTANCIA DEL APROVECHAMIENTO DE LAS AGUAS RESIDUALES EN LA REGIÓN DE MURCIA.

La cuenca del río Segura se encuentra en el sureste de España y tiene una superficie de 18.740 km², tiene un clima semiárido, con una precipitación media de 400 mm año⁻¹, unas temperaturas medias anuales comprendidas entre 10 y 18 ° C y con una evapotranspiración potencial media de 700 mm año⁻¹ (Pellicer y Martínez-Paz, 2018).

Dentro de la cuenca del Segura, está la Región de Murcia con una superficie de 11.313 km² y una superficie agrícola regada de 188.534 has en la que el consumo (urbano, industrial y agrícola) ha aumentado en los últimos años dando como resultado una sobreexplotación del agua (Martínez-Alcalá et al., 2018). Durante el período 2011-15 se han tratado en la Región de Murcia aproximadamente 105 hm³ año⁻¹ de aguas residuales que representa cerca del 10% de la demanda neta total de las unidades de demanda agraria (UDA) de la demarcación hidrográfica del Segura (ESAMUR, 2018). Es por lo que debido a este déficit hídrico, la reutilización de aguas residuales en la agricultura tiene una importancia muy alta en la Región de Murcia, ya que conduce a una gestión más eficaz de los recursos hídricos.

IV - OBJETIVOS

IV - OBJETIVOS

4.1. OBJETIVOS DE LA INVESTIGACIÓN

El objetivo principal de esta tesis doctoral es la validación agronómica del tratamiento de aguas en lo que a CEs se refiere en su aprovechamiento como agua de riego en cultivos hortícolas en la Región de Murcia.

Para la consecución de este objetivo principal, se contemplan los siguientes objetivos que han ido surgiendo en el transcurso de la investigación:

- Comprensión de la interacción entre el movimiento y la absorción de agua en las plantas y el transporte de los compuestos químicos.
- Identificar los parámetros y las propiedades físico - químicas más influyentes de los CEs en la absorción, traslocación y acumulación en las diferentes partes de las plantas (tejidos aéreos y subterráneos).
- Estudiar el comportamiento y la respuesta de los diferentes cultivos hortícolas (lechuga, perejil, col, brócoli y calabacín) regados con agua que contiene CEs.
- Caracterizar y realizar la elección de los vegetales más sensibles en la captación y absorción de CEs entre los cultivos estudiados.
- Determinar la absorción y acumulación de los CEs estudiados (CBZ, DCF, IBP, KTP y NPX) en los tejidos de los cultivos estudiados mediante el riego de los cultivos seleccionados con agua mezclada con CEs a diferentes concentraciones.
- Modelización de la absorción de CEs para predecir el comportamiento, la asimilación y la distribución de los CEs a diferentes concentraciones mezclados en agua, en las diferentes partes de los tejidos de las lechugas (hojas y raíces) mediante la calibración de dos modelos de simulación. El primer modelo de simulación ha sido un Sistema Experto Inteligente (SEI) desarrollado por el Departamento de Ciencias Politécnicas del Grado en Ingeniería Informática de la UCAM y el segundo el modelo New Plant Uptake Model for ionizable compounds 2 x 2 matrix. monovalent acids and bases (NPUM), desarrollados por la Technical University of Denmark (DTU).

- Predicción de absorción y acumulación de CBZ y DCF en los tejidos de las lechugas (hojas y raíces) con los los modelos de simulación SEI y NPUM, utilizando como parámetro de entrada en los modelos la concentración de CBZ y DCF en el efluente de las EDAR y de KTP y NPX con el modelo de simulación NPUM, realizando un mapa de concentraciones de CEs en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.
- Estudiar si las concentraciones de CEs en los cultivos estudiados resultantes de los experimentos realizados y de las predicciones desarrolladas por los dos modelos de simulación SEI y NPUM, suponen algún riesgo para la salud humana al superar las concentraciones diarias ingeridas de CEs los límites aceptables.

V - MATERIAL Y MÉTODO

V - MATERIAL Y MÉTODO

5.1. SELECCIÓN DE CE_s PARA EL ESTUDIO

Los CE_s se seleccionaron en este estudio en función de su presencia en los influentes: 420 ng L⁻¹ Carbamazepina (CBZ), 250 ng L⁻¹ diclofenaco (DCF), 516 ng L⁻¹ Ibuprofeno (IBP), 451 ng L⁻¹ Ketoprofeno (KTF), 99 ng L⁻¹ naproxeno (NPX) y efluentes: 410 ng L⁻¹ CBZ, 216 ng L⁻¹ DCF, 266 ng L⁻¹ IBP, 318 ng L⁻¹ KTF, 108 ng L⁻¹ NPX en diferentes EDAR (Petrovic et al, 2005); presencia en aguas superficiales y subterráneas en los siguientes países: Alemania (Hirsch et al., 1999; Putschew et al., 2000; Ternes, 1998; Ternes y Hirsch, 2000), Holanda (Belfroid et al., 1999), Suiza (Soulet et al., 2002), Italia (Castiglioni et al., 2004), Estados Unidos (Drewes et al., 2001; Kolpin et al., 2002), Canadá (Miao et al., 2004; Ternes et al., 1999), China (Chen et al., 2011; Sui et al., 2010; Yuan et al., 2013), Brasil (Ternes et al., 1999) y también sobre sus efectos en la salud humana. En España, algunos CE_s han sido identificados en diferentes estudios. Se identificaron alrededor de 20 CE_s en 18 puntos de muestreo en el río Ebro (Petrovic et al., 2005). En otro estudio, se encontraron un total de 20 CE_s en agua de mar y 14 en sedimentos en el Mar Menor (Moreno-González et al., 2015) y luego se identificaron y cuantificaron cuatro CE_s en los influentes y efluentes de 12 EDAR en la Región de Murcia (Fernández-López et al., 2016).

Hay muchos estudios realizados sobre el impacto del riego con aguas residuales en la agricultura y los posibles riesgos para la salud humana. De acuerdo con investigaciones realizadas, la absorción de CE_s por cultivos en los que se han utilizado aguas residuales procedentes de EDAR es una forma de incorporar los diferentes CE_s en la cadena alimentaria. (Weber et al., 2006).

En la Figura 3 se puede apreciar el paso del proceso de absorción de los CE_s desde que se riega con agua procedente de EDAR hasta que se incorpora a la cadena alimentaria.

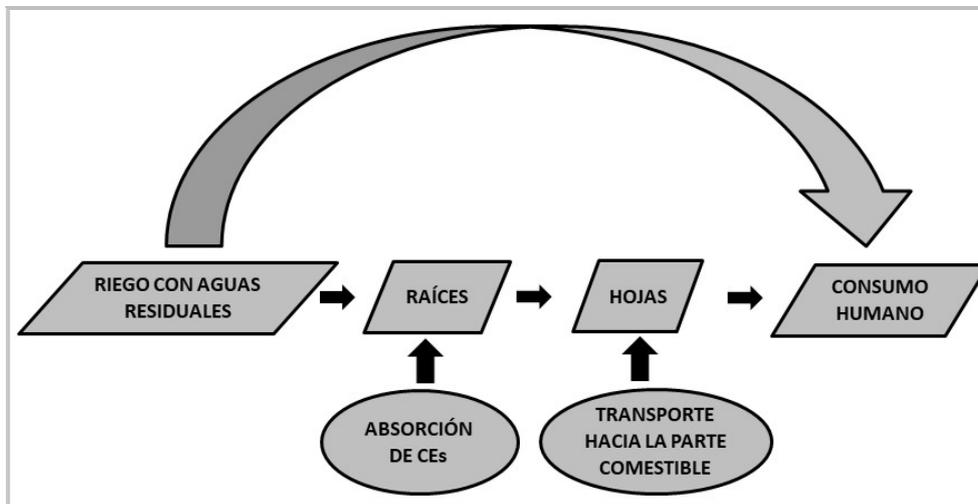


Figura 3. Proceso de traslocación de los CE hasta la parte comestible de las lechugas. Fuente: elaboración propia

Son diversos parámetros los que influyen en la captación de CE's por los vegetales. En la Tabla 1 podemos observar los parámetros que influyen en la absorción de los CE's en diferentes estudios realizados previamente.

Tabla 1. Tabla con los parámetros que influyen en la absorción de los CE's en diferentes estudios realizados previamente

	CBZ	DCF	IBP	KTP	NPX
log K _{ow} ^a	2,30	4,50	3,50	3,10	3,20
Peso molecular ^b	236,27	296,14	206,28	254,28	230,26
Absorción en plantas ^c	Si	Si	Si	Si	Si
Referencias en estudios	Si ^d	Si ^e	Si ^f	Si ^g	Si ^h

^a Episuite v4.11 (<http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm>).

^b PubChem Compound (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pccompound>).

^c Lipinski et al. (2001).

^d Wu et al., 2010

^e Carter et al., 2014.

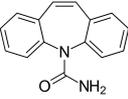
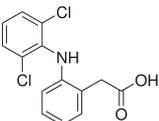
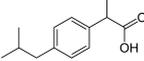
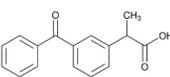
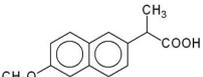
^f Wu et al., 2013.

^g Goldstein et al., 2014.

^h Wu et al., 2013; Goldstein et al., 2014.

La siguiente tabla (Tabla 2) muestra la estructura y las propiedades fisicoquímicas de los CE seleccionados. La CBZ (C4021-1G), el DCF (D6899-10G), el IBP (I4883-1G), el KTP (1751-1G) se adquirieron en Sigma-Aldrich (Steinheim, Alemania) y el NPX (N8280-5G) se adquirió en Fluka.

Tabla 2. Tabla de las propiedades fisicoquímicas de los CE estudiados

	CBZ	DCF	IBP	KTP	NPX
Estructura Molecular					
Número CAS	298-46-4	15307-86-5	15687-27-1	22071-15-4	22204-53-1
Fórmula	C ₁₅ H ₁₂ N ₂ O	C ₁₄ H ₁₁ Cl ₂ NO ₂	C ₁₃ H ₁₈ O ₂	C ₁₆ H ₁₄ O ₃	C ₁₄ H ₁₄ O ₃
Solubilidad Agua (mg·L ⁻¹) ^a	17,7	2,37	21	51	15,9
log K _{OA} ^b	10,81	14,22	9,18	12,18	11,03
log K _{AW} ^c	-8,35	-9,71	-5,21	-9,06	-7,85

^a PubChem Compound (<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pccompound>).

^b Episuite v4.11 (<http://www.epa.gov/opptintr/exposure/pubs/episuite.htm>).

^c ACD/I-Lab (<https://weblab.acdlabs.com/iLab2/index.php>).

5.2. DISEÑO DE CAMPO

Los experimentos se llevaron a cabo en las instalaciones del Centro de Edafología y Biología Aplicada del Segura (CEBAS), Instituto de investigación que cuenta instalaciones adecuadas para realizar investigaciones relacionadas con el campo de la agricultura y la tecnología de los alimentos. Este Instituto de investigación cuenta con un amplio invernadero con una superficie de 680 m² ubicado en la estación experimental de agricultura CEBAS-CSIC (37°47'48.88"N, 95°7'33.63"O) en Balsicas-Lo Ferro (Murcia, España). Anexo a este invernadero está la EDAR de Roldán-Balsicas, que recibe todos los efluentes domésticos e industriales de Lo Ferro, Roldán y Balsicas (Murcia).

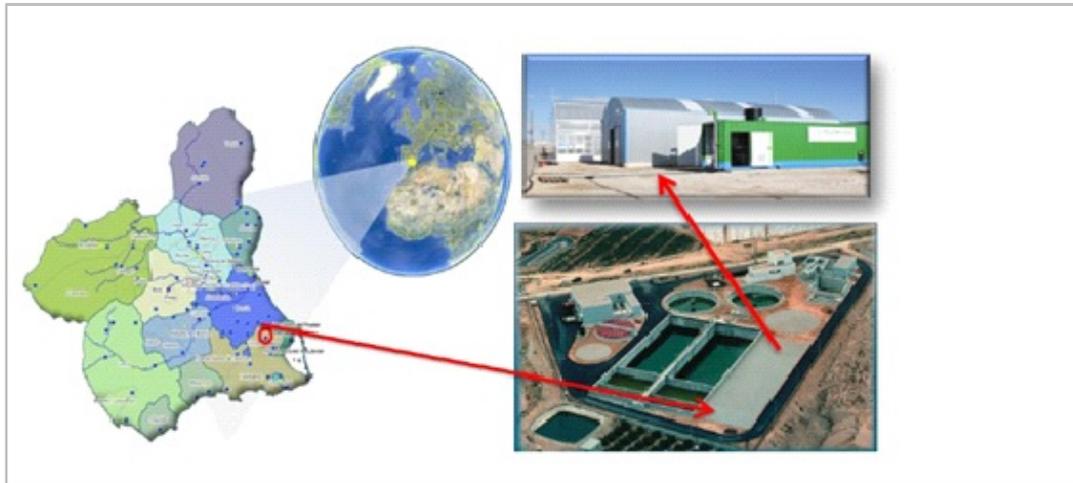


Figura 4. Localización de la EDAR y la Parcela experimental ubicada en las instalaciones de la planta Roldán-Balsicas, Lo Ferro. Murcia, (España). Fuente: CEBAS-CSIC



Figura 5. Aprovechamiento esquemático del agua regenerada en la EDAR de Roldán-Balsicas (Murcia). Fuente: elaboración propia

La EDAR está diseñada para una población equivalente de 8910 PE y tiene un sistema primario de tratamientos fisicoquímicos, un sistema secundario que consiste en un reactor biológico formado por lodo activado, y un tratamiento terciario basado en radiación ultravioleta, y su capacidad de diseño es de $5,5 \text{ m}^3 \text{ d}^{-1}$.

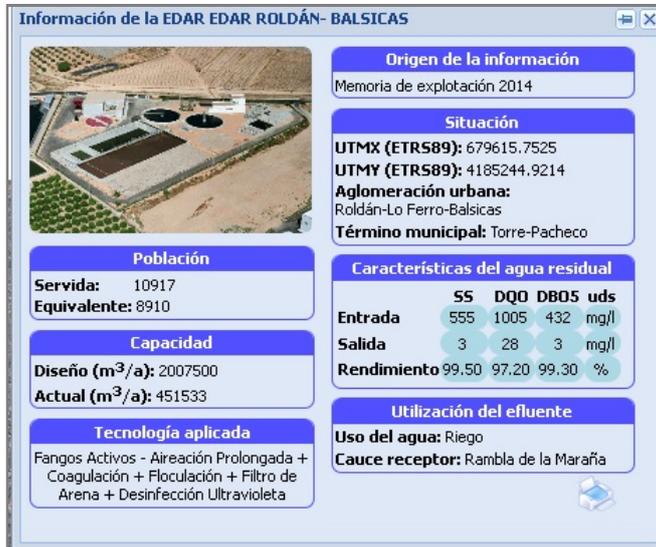


Figura 6. Características técnicas de la EDAR de Roldán-Balsicas (Murcia). Fuente: <http://gis.esamur.com/>



Figura 7. Vista de las instalaciones de la EDAR de Roldán-Balsicas (Murcia). Fuente: CEBAS-CSIC

5.3. DISEÑO EXPERIMENTAL EN EL INVERNADERO

5.3.1. Primer experimento de cultivos hidropónicos

Con el fin de caracterizar y realizar la elección de los vegetales más sensibles en la captación y absorción de CE_s se diseñó un primer experimento en el que se estudió la absorción de los CE_s en los siguientes cultivos: lechuga, perejil, col, brócoli y calabacín.

El experimento se llevó a cabo en los meses de febrero, marzo y abril de 2016 en el invernadero situado en las instalaciones anexas a la EDAR de Roldán-Balsicas (Murcia, España) de donde se obtuvo el agua de riego para regar las plantas en el interior del invernadero.



Figura 8. Vista exterior del invernadero anexo a la EDAR de Roldán-Balsicas donde se han realizado los experimentos. Fuente: CEBAS-CSIC



Figura 9. Vista exterior de la EDAR de Roldán-Balsicas y de los invernaderos. Fuente: CEBAS-CSIC

Para este primer experimento se escogieron los cultivos más representativos y estudiados en la literatura en cuanto a la absorción de CEs se refiere (Aryal y Reinhold, 2011; Herklotz et al., 2010; Hurtado et al., 2016; Hyland et al., 2015; Paltiel et al., 2016; Santiago et al., 2016).

Los cultivos y las partes estudiadas de los mismos se pueden apreciar en la siguiente tabla:

Tabla 3. Tabla con los cultivos y los diferentes tejidos analizados

Planta	Partes analizadas
Lechuga Mini Romana var. Jabera	Hoja/Raíz
Perejil var. Parsley	Hoja/Tallo/Raíz
Col Picuda var. Duchy	Hoja/Raíz
Brócoli var. Parthenon	Hoja/Flor/Raíz
Calabacín var. Black star	Hoja/Fruto/Raíz

El invernadero contaba con plena luz natural y se realizó una analítica del efluente de la EDAR, para detectar la presencia de los cinco CEs (CBZ, DCF, IBP, KTP y NPX) en el agua de riego de los cultivos, detectando diferentes concentraciones de los CEs según se puede ver en la Tabla 4 (Martínez-Alcalá et al., 2017).

Tabla 4. Concentración de los CEs estudiados en el efluente de la EDAR

CE	Concentración (ng L⁻¹)
CBZ	10,11 ± 0,07
DCF	6,64 ± 0,30
IBP	1,80 ± 0,21
KTP	18,97 ± 1,37
NPX	11,53 ± 4,25

Con las concentraciones de CEs detectadas en el efluente que no se eliminaron durante el proceso de depuración, se estudió la posible captación y acumulación de CEs en los tejidos de los diferentes cultivos estudiados (lechuga, perejil, col, brócoli y calabacín) al aprovecharse este efluente como agua de riego sin sufrir ningún tratamiento posterior para eliminar dichos CEs. El agua del efluente procedente de la EDAR se recogió dos veces por semana para almacenarse en un depósito próximo al invernadero y así minimizar cualquier alteración de la misma provocado por el almacenamiento del mismo (Shenker et al., 2011).

En la siguiente figura (Figura 10) se puede ver esquemáticamente el proceso de aprovechamiento del efluente de la EDAR como agua de riego tras pasar por el proceso de depuración.

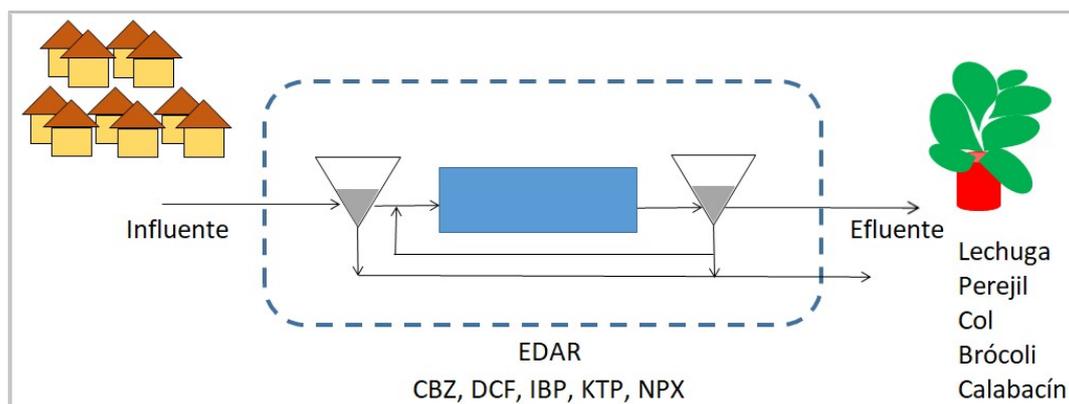


Figura 10. Esquema del experimento del aprovechamiento del efluente procedente de la EDAR como agua de riego en los cultivos estudiados (Fuente: elaboración propia).

El efluente de la EDAR se aprovechó como agua de riego durante todo el ciclo de los cultivos desde que se pusieron en semillero hasta su posterior recolección para analizar.

Las plantas se regaron mediante riego por goteo con cuatro goteros por bolsa y cada gotero tenía un caudal de 3 L h^{-1} y estaban separados 25 cm cada uno. Previamente se realizó una analítica de los nutrientes del agua de riego (Anexo I, Tabla S1) y se enriqueció el agua de riego con una solución nutritiva, como se puede ver en la siguiente tabla:

Tabla 5. Composición de la solución nutritiva aplicada a los vegetales.

Nutriente	Concentración (kg ha^{-1})
N	71,54
P_2O_5	59,57
K_2O	118,72
CaO	39,32

Se realizó un semillero con los cultivos y variedades descritos anteriormente donde germinaron y posteriormente fueron trasplantados en bolsas de sustrato de fibra de coco (Figura 11) con las siguientes dimensiones cada una: 100 x 20 x 15 cm. La elección de la fibra de coco estuvo motivada con el fin de homogenizar el sustrato en todos los cultivos y así evitar cualquier influencia del uso de un sustrato no homogéneo que pudiera afectar a los resultados obtenidos.



Figura 11. Foto detalle de las bolsas de sustrato de fibra de coco. Fuente: elaboración propia

En la siguiente tabla, se pueden observar las propiedades fisicoquímicas del sustrato de fibra de coco:

Tabla 6. Propiedades fisicoquímicas del sustrato de fibra de coco

Determinaciones	Resultados
Humedad (%)	66,60
Materia seca (%)	34,00
Conductividad eléctrica (mS cm ⁻¹)	0,80
pH	6,18
Cenizas	31,90
Materia orgánica (%)	68,10
Carbono orgánico total (%)	39,50
N total (%)	0,62
P total (%)	0,04
K total (%)	1,00
Ca total (%)	0,19
Mg total (%)	0,10
Fe total (%)	0,31
Mn total (%)	0,01
B total (mg kg ⁻¹)	9,90
Cu total (mg kg ⁻¹)	6,40
Zn total (mg kg ⁻¹)	20,60
Granulometría	
Tamiz 31,5 mm	<0,01
Tamiz 16,0 mm	<0,01
Tamiz 8,0 mm	10,31
Tamiz 4,0 mm	4,48
Tamiz 2,0 mm	3,05
Tamiz 1,0 mm	7,75

Otra característica, por la que se eligió el sustrato de fibra de coco, es la facilidad para la separación de las raíces del sustrato para su posterior procesamiento y analítica de las mismas.



Figura 12. Vista general en el interior del invernadero con los cultivos hidropónicos donde se han realizado los experimentos. Fuente: elaboración propia

Se distribuyeron un total de 712 plantas en el invernadero de 680 m², que se dividió en 24 subparcelas (líneas) donde se plantaron los cinco tipos de hortalizas: 180 plantas de Lechuga Mini Romana var. Jabera, 172 plantas de Perejil var. Parsley, 120 plantas de Col Picuda var. Duchy, 120 plantas de Brocoli var. Parthenon y 120 plantas de Calabacín var. Black star; y así poder estudiar la predisposición a la acumulación de los CEs en los cultivos.



Figura 13. Vista de detalle del interior del invernadero con el cultivo hidropónico. Fuente: elaboración propia

En el interior del invernadero, todos los parámetros de humedad, temperatura, transpiración, riego, aporte de fertilizante, ..., estuvieron controlados en todo momento informáticamente para evitar que cualquier variación en las condiciones del cultivo pudiera influir negativamente en el ciclo vegetativo de los cultivos e impidieran desarrollar el experimento con total normalidad. Se registraron de manera automática todas estas variables, para poder analizar posteriormente su evolución.



Figura 14. Vista en el interior del invernadero del resto de los cultivos estudiados. Fuente: elaboración propia

Con el fin de evitar la aparición de malas hierbas en el interior del invernadero, se instalaron unas láminas en el suelo entre cada línea de plantas. Encima de estas láminas se colocaron las bolsas con el sustrato de fibra de coco. De esta forma evitamos que las posibles malas hierbas que crecieran anexas a los cultivos estudiados pudieran competir por el agua y los nutrientes con los cultivos e incluso pudieran absorber parte de los CEs analizados y alterar los resultados obtenidos en el momento de analizar los tejidos vegetales de los cultivos al no disponer de la concentración de CEs en su totalidad.

Los cultivos se distribuyeron con un diseño aleatorio para evitar posibles interacciones de la localización de estos en el interior del invernadero, evitando además el efecto borde, de tal forma que su distribución no afectara a los resultados y así fueran lo más homogéneos posible. Cada parcela se dividió en 8 subparcelas (líneas), lo que contribuyó a tener espacio suficiente entre ellas para acceder a los cultivos con facilidad y poder realizar las operaciones de riego en los cultivos de la mezcla de CEs y realizar las operaciones de recolección de las plantas de una manera más fácil y eficaz.

En la siguiente figura (Figura 15) podemos ver la distribución de los cultivos en la parcela 1 del invernadero.

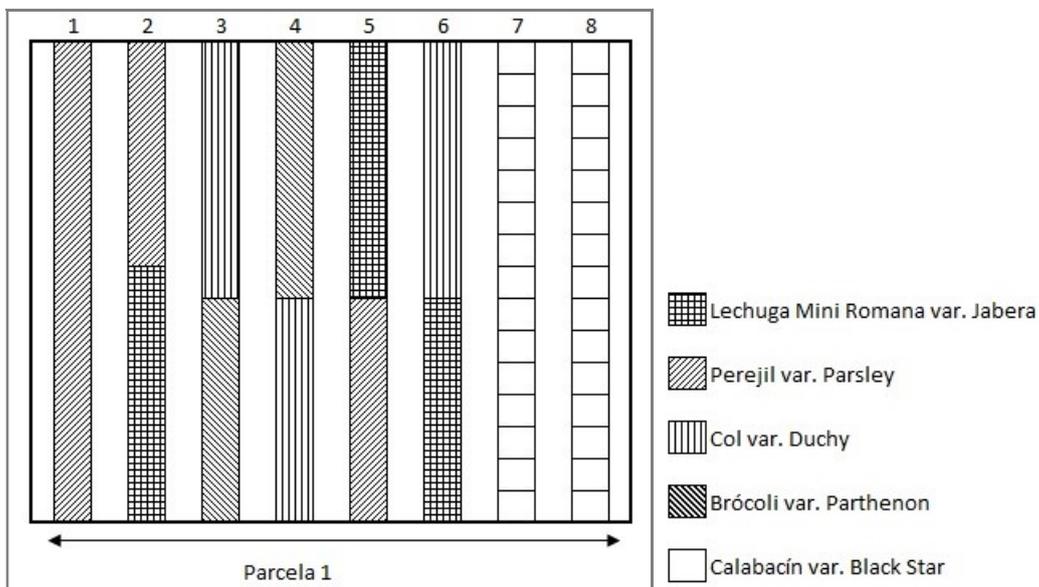


Figura 15. Vista de la distribución espacial de los cultivos en la parcela 1 en el interior del invernadero. Fuente: elaboración propia

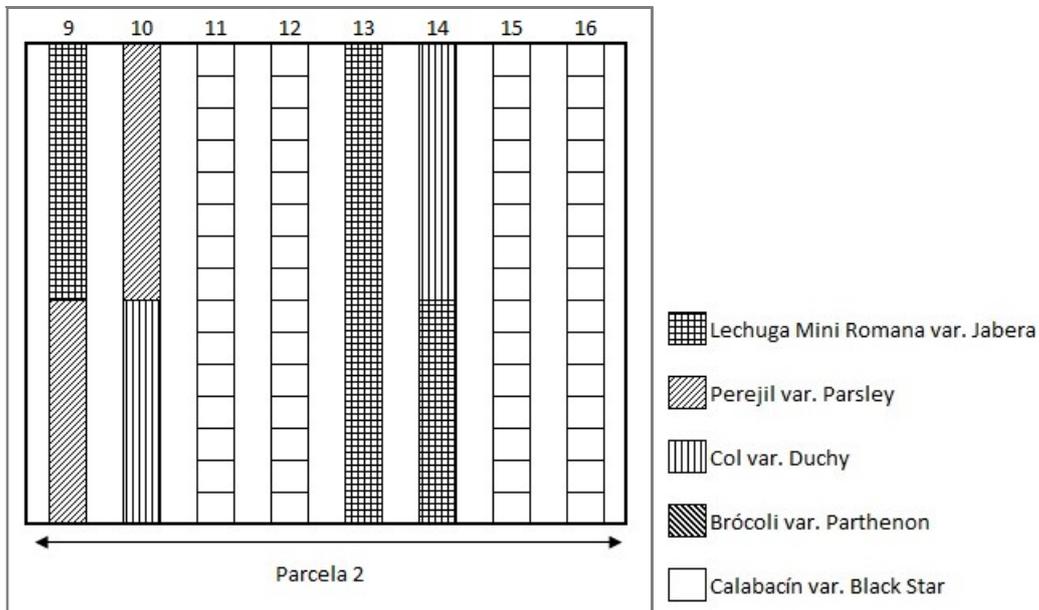


Figura 16. Vista de la distribución espacial de los cultivos en la parcela 2 en el interior del invernadero. Fuente: elaboración propia

Como se puede apreciar en las figuras (Figuras 15-17), en las tres parcelas en las que se dividió el invernadero, se repitieron los cinco cultivos para evitar que cualquier problema que pudiera afectar al crecimiento y desarrollo de un cultivo en particular o incluso le llevara a causar baja al no terminar el ciclo vegetativo, redujera las variedades de los cultivos a estudiar y afectara al desarrollo del experimento planteado. De esta manera evitamos este riesgo y se pudo realizar el experimento con la seguridad de analizar los cinco cultivos planteados.

En esta parcela se puede observar como también se distribuyeron los cultivos de una forma aleatoria.

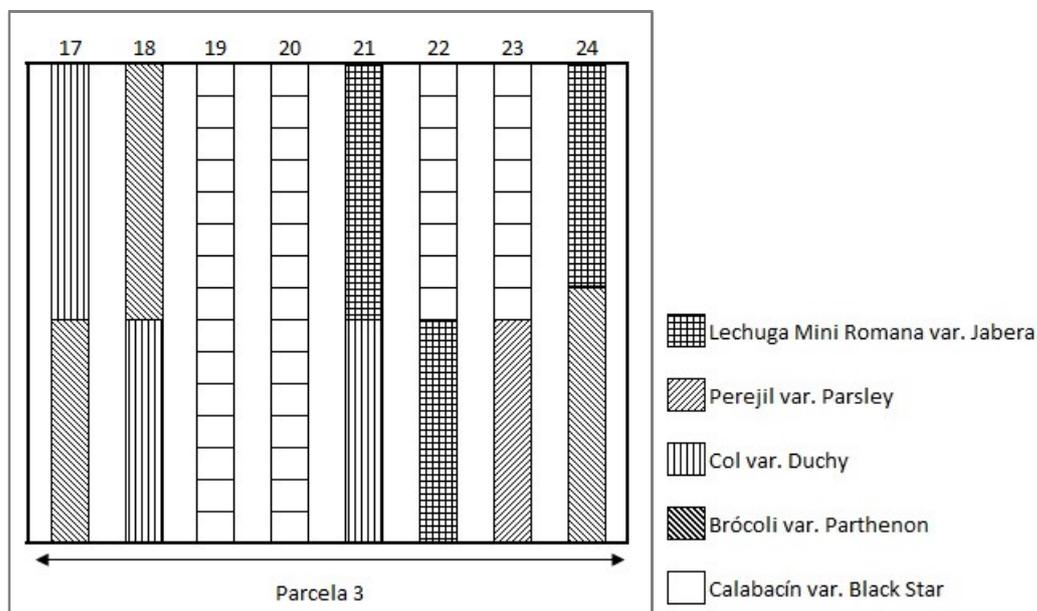


Figura 17. Vista de la distribución espacial de los cultivos en la parcela 3 en el interior del invernadero. Fuente: elaboración propia

Los cultivos estuvieron en el invernadero hasta el fin del ciclo vegetativo de cada uno de ellos. Al final del ciclo de cada cultivo, estos se recolectaron teniendo la precaución al extraer las plantas del sustrato de la fibra de coco de no arrancar y perder las raíces, debido a que la raíz era una de las partes más importantes de la planta a analizar. Al aplicar los CEs por el agua de riego en la fibra de coco, la raíz es la parte de la planta por donde se absorbieron los CEs y depende del cultivo y las propiedades fisicoquímicas de cada CE, la capacidad de translocación del CE desde las raíces al resto de la planta (tallos, hojas y frutos). Por este motivo, se estudiaron en este primer experimento, cultivos diferentes y CEs con diferentes propiedades fisicoquímicas para observar el comportamiento y la acumulación de los CEs en todas las partes de las plantas.

5.3.2. Segundo experimento de cultivos hidropónicos.

Como continuación del primer experimento, este segundo experimento se llevó a cabo en el verano de 2016 (junio, julio y agosto) en las mismas instalaciones en las que se desarrolló el primer experimento (invernadero propiedad del CEBAS-CSIC ubicado en las instalaciones adyacentes a la EDAR de Roldán, Lo Ferro y Balsicas, Murcia, España).

En este segundo experimento a la vista de los resultados obtenidos en el primer experimento en los cultivos, el estudio se centró en el cultivo de las lechugas donde se estudiaron tres variedades de lechuga (Lechuga Iceberg var. Gitana, Lechuga Mini Romana var. Jabera y Lechuga Hoja de Roble var. Kiprien) y así poder observar el comportamiento y la respuesta del cultivo de lechuga a la exposición de CEs. Con respecto a la selección de CEs a estudiar en este segundo experimento, se escogieron la CBZ (anticonvulsivo) y el DCF (antiinflamatorio) para que pudiéramos comparar y valorar el comportamiento, la absorción y la translocación de los mismos desde la raíz hasta el resto de la planta de dos CEs con diferentes propiedades fisicoquímicas. Se utilizó el efluente de la EDAR Roldán, Lo Ferro y Balsicas como agua de riego en este experimento y se realizó una nueva analítica del efluente de la EDAR y los resultados en el momento del estudio no revelaron la presencia de CBZ y DCF ya que sus concentraciones estaban por debajo de los límites de detección (Anexo I, Tabla S3), lo que puede ser explicado debido a la degradación de los CEs por las altas temperaturas de la estación meteorológica en la que se realizó el experimento, unido a las bajas concentraciones de CEs detectadas en análisis realizados anteriormente. Por este motivo, para realizar este experimento, ya que no hubo detección de CEs en el efluente, hubo que diseñar el experimento con dopaje o aporte de directo de una mezcla de CBZ y DCF en el agua de riego. Ambos CEs se adquirieron a Sigma-Aldrich (Steinheim, Alemania), en envases individuales para posteriormente realizar las disoluciones ajustadas a las concentraciones necesarias a aportar de la CBZ (C4021-1G) y DCF (D6899-10G).

En la siguiente figura (Figura 18), se puede apreciar el diseño de este segundo experimento planteado para observar la respuesta del cultivo de lechugas a la exposición de CBZ y DCF.

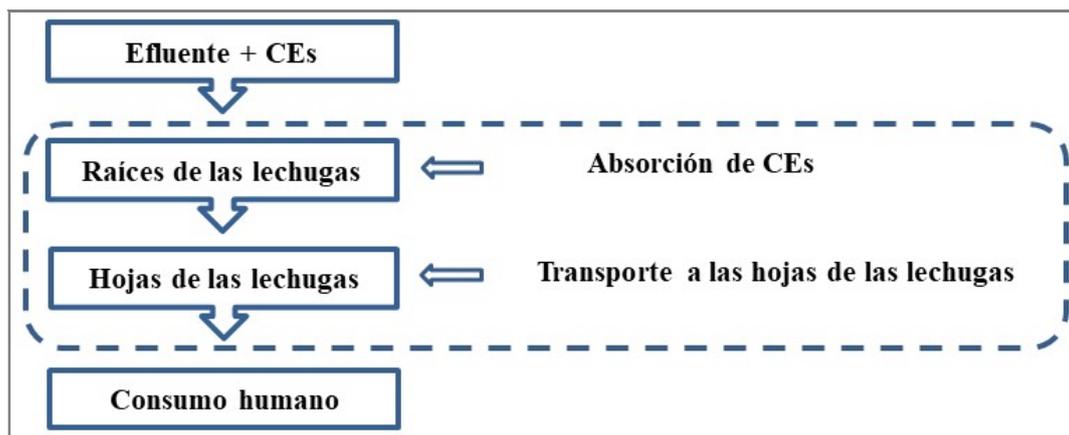


Figura 18. Diseño del experimento para estudiar la absorción de CEs hasta la parte comestible de las lechugas. Fuente: elaboración propia

Las tres variedades de lechugas estuvieron expuestas en el interior del invernadero a unas condiciones ambientales controladas con luz natural y unas temperaturas que oscilaron entre 25 y 41 ° C, según los datos registrados por la estación meteorológica de CEBAS-CSIC. Las lechugas germinaron en un semillero y posteriormente se repicaron y fueron trasplantadas en el interior del invernadero. En este experimento, se utilizó una parcela en el interior del invernadero como zona de cultivo, la cual se dividió en seis subparcelas (líneas) en las que se plantaron tres variedades de lechugas: Lechuga Iceberg var. Gitana, Lechuga Mini Romana var. Jabera y Lechuga Hoja de Roble var. Kiprien. Estas seis parcelas, se dividieron experimentalmente en cinco unidades experimentales según la concentración de CEs a las que estuvieron expuestas las lechugas (cada unidad experimental contenía ocho plantas de cada variedad de lechuga). Cuatro unidades se regaron con el efluente de la EDAR al que se añadieron CBZ y DCF a las siguientes concentraciones: 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$, mientras otra unidad era un blanco (agua del efluente de la EDAR sin añadir ninguna concentración de CEs). Se realizaron tres réplicas de cada unidad experimental para asegurar los resultados obtenidos y amortiguar cualquier alteración en el manejo del cultivo que pudiera afectar a los resultados. En la siguiente figura (Figura 19) se puede apreciar el planteamiento del experimento explicado anteriormente donde para estudiar la capacidad de absorción de CEs de las tres

variedades de lechugas, las plantas se regaron con el efluente de la EDAR al que se añadieron CBZ y DCF a diferentes concentraciones.

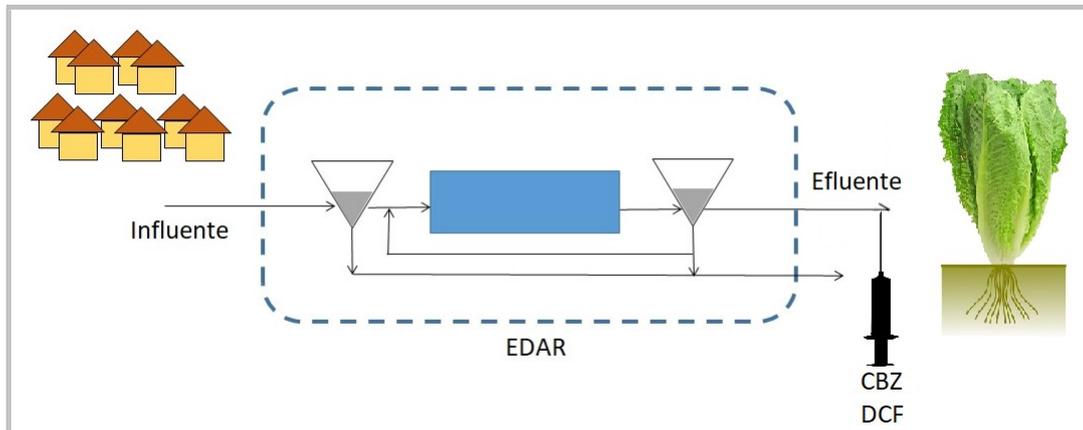


Figura 19. Esquema del aprovechamiento del efluente procedente de la EDAR como agua de riego mezclada con CBZ y DCF a diferentes concentraciones. Fuente: elaboración propia

Las lechugas al igual que en el primer experimento, se plantaron en bolsas de sustrato de fibra de coco con las siguientes dimensiones cada una: 100 x 20 x 15 cm. Las lechugas se regaron mediante riego por goteo con cuatro goteros por bolsa y cada gotero tenía un caudal de 3 L h⁻¹ y estaban separados 25 cm cada uno. Se enriqueció el agua del efluente de la EDAR utilizada como agua de riego con la misma solución nutritiva que en el primer experimento mostrada en la tabla 5 (previamente se realizó una analítica de los nutrientes del agua de riego. Anexo II, Tabla S5).

La distribución de las tres variedades de lechuga de este segundo experimento planteado en el interior del invernadero quedaría como se puede ver en la siguiente figura (Figura 20):

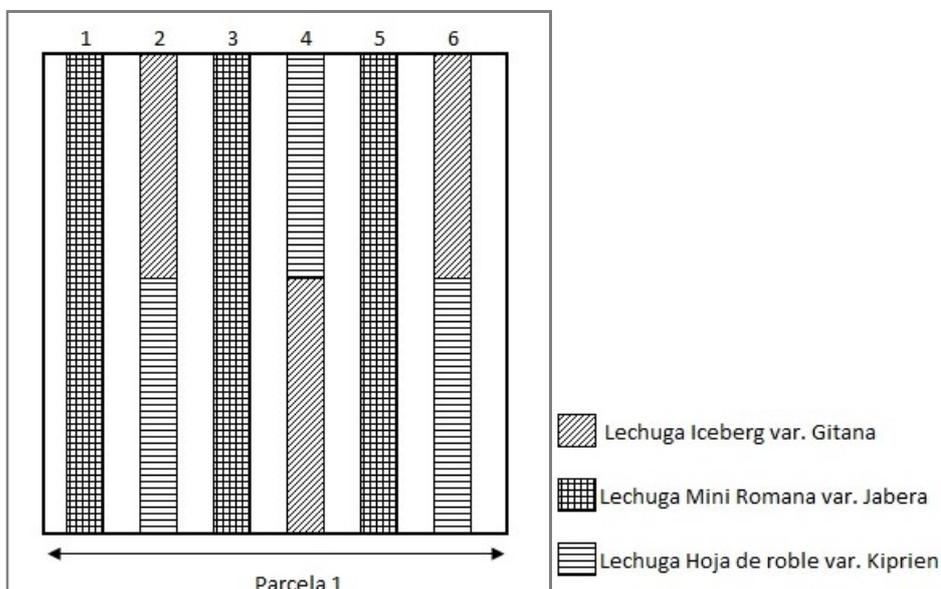


Figura 20. Vista de la distribución espacial de las tres variedades de lechuga en la parcela 1 en el interior del invernadero. Fuente: elaboración propia

Como se puede apreciar en la figura, se siguió el mismo criterio que en el primer experimento y en las 6 líneas (subparcelas) en las que se realizó el experimento, se distribuyeron aleatoriamente las tres variedades de lechuga para evitar que cualquier problema que pudiera afectar al crecimiento y desarrollo de una variedad en particular o incluso le llevara a causar baja al no terminar el ciclo vegetativo, redujera las variedades de las lechugas a estudiar y afectara al desarrollo del experimento planteado. De esta manera evitamos este riesgo y se pudo realizar el experimento con la seguridad de analizar las tres variedades de lechuga planteadas.

En este segundo experimento la separación entre las bolsas con el sustrato de fibra de coco fue mayor que en el anterior experimento, debido a que en este experimento se centró el estudio en las tres variedades de lechuga y había más espacio en el invernadero. Igual que en el primer experimento, con el fin de evitar la aparición de malas hierbas en el interior del invernadero, se instalaron unas láminas en el suelo entre cada línea de plantas. Encima de estas láminas se colocaron las bolsas con el sustrato de fibra de coco. De esta forma evitamos que las posibles malas hierbas que crecieran anexas a los cultivos estudiados pudieran competir por el agua y los nutrientes con los cultivos e incluso pudieran absorber parte de la CBZ y DCF aplicadas en las lechugas y alterar los resultados obtenidos en el momento de analizar los tejidos vegetales de los cultivos.



Figura 21. Vista interior del invernadero con las unidades de experimentación de lechugas. Fuente: elaboración propia

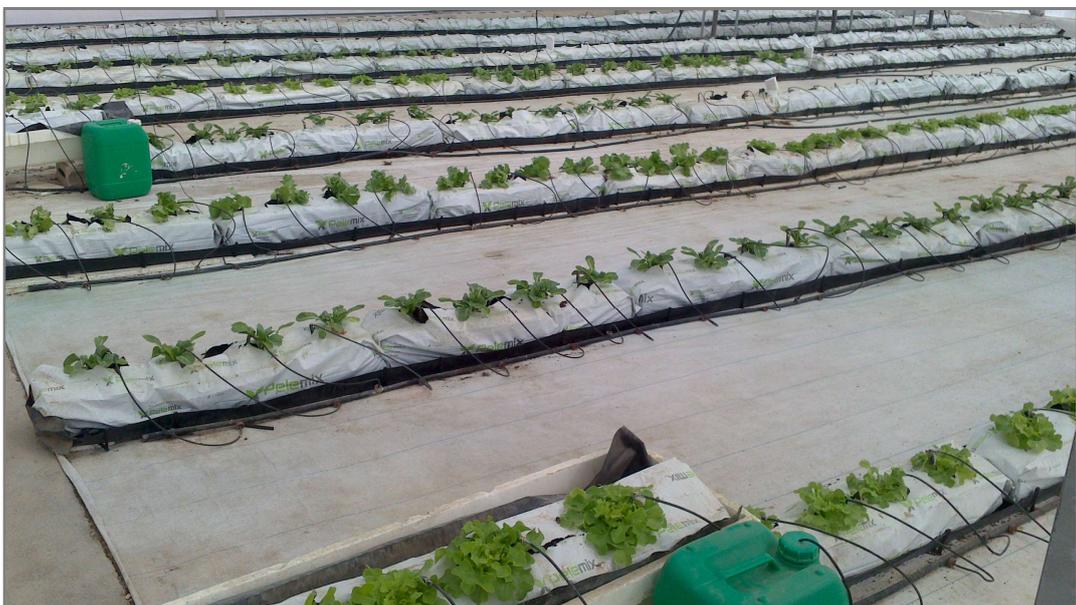


Figura 22. Distribución interior del invernadero de las tres variedades de lechugas. Fuente: elaboración propia

Se aplicó una dosis de riego de 8 litros por unidad por día (1 litro por planta y día). Al igual que en el primer experimento, el agua regenerada procedente de la EDAR se

recogió dos veces por semana para minimizar cualquier alteración de la misma como consecuencia de su almacenamiento en el depósito de agua habilitado para tal fin (Shenker et al., 2011). Se prepararon las mezclas de los dos CE's a diferentes concentraciones en recipientes de vidrio negro para protegerlos de la luz solar y evitar su degradación. En la preparación de la mezcla de los CE's (CBZ y DCF) en el agua para posteriormente aplicarlo a las plantas, se empleó un agitador muy lentamente hasta que los CE's quedaron totalmente disueltos en el agua. Dada la época del año en la que se realizó este experimento y las altas temperaturas registradas durante los meses de verano, la preparación de la mezcla de los CE's se realizó en un lugar con temperatura regulada para evitar las altas temperaturas y el transporte de los mismos hasta el invernadero, se realizó en nevera refrigerada con hielo, evitando la degradación de la mezcla de los CE's preparados, lo cual afectaría negativamente al desarrollo del experimento, falseando los resultados obtenidos en los análisis realizados en las hojas y raíces de las lechugas al no estar expuestas a la concentración de CE's diseñada inicialmente en el experimento (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$). Una vez preparadas las mezclas de los dos CE's, la mezcla resultante se disolvió en el agua de cada tanque dispuesto por cada línea de riego y se aplicó directamente en la planta por el riego por goteo (Figura 17). Todos los recipientes utilizados para preparar las mezclas de medicamentos se lavaron a fondo con metanol y acetona antes de su uso para eliminar cualquier resto que pudiera afectar los resultados del estudio. Las plantas se regaron con las mezclas de CE's durante un período de 13 días a partir de las seis semanas posteriores a la siembra. El experimento duró un total de ocho semanas. En la siguiente tabla se puede ver la dosis de CE's aplicada por unidad experimental.

Tabla 7. Planificación de la dosis de CE aplicada por unidad experimental y variedad.

Fecha	Dosis de CE $\mu\text{g L}^{-1}$						
	l/planta	l/tratamiento	0	30	60	120	210
09/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
10/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
11/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
12/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
13/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
14/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
15/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
16/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
17/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
18/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
19/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
20/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680
21/08/2016	1	8	0	240	480	960	1.680

La aplicación de la mezcla de CBZ y DCF se realizó en las dos últimas semanas de cultivo (Figura 23) de las tres variedades de lechuga y al finalizar el ciclo vegetativo se recolectaron las lechugas.

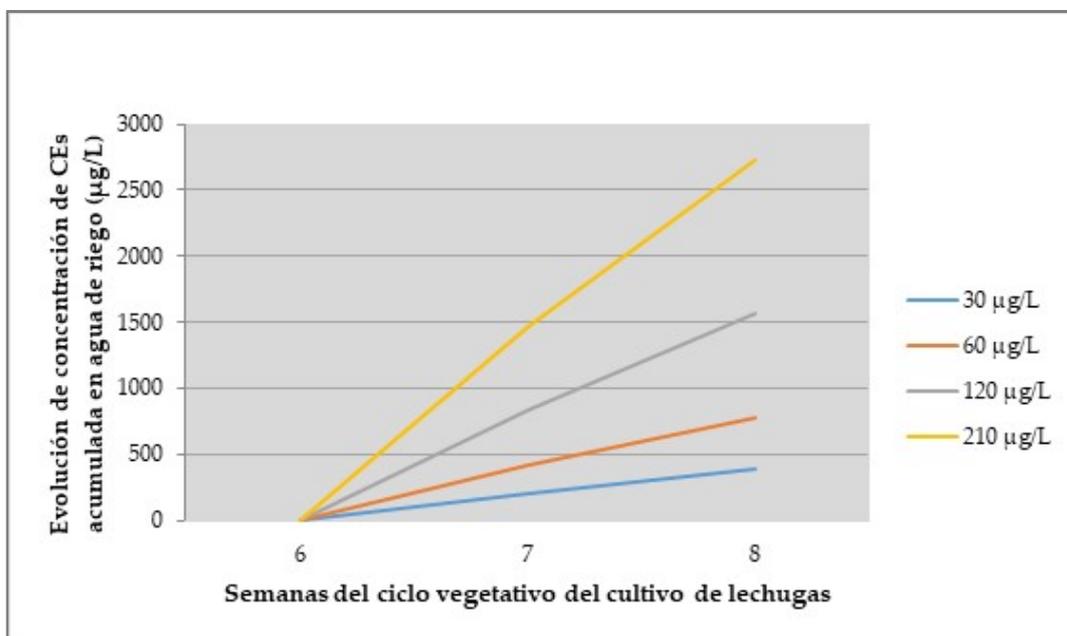


Figura 23. Gráfica de la evolución de la dosis acumulada de la mezcla de CE aportada en el agua de riego según la semana del ciclo vegetativo del cultivo. Fuente: elaboración propia

Al diseñar el experimento con las mismas concentraciones de CBZ y DCF en el agua de riego, nos aseguramos de que de los resultados analíticos que vamos a obtener en la concentración de CE en hojas y raíces de las tres variedades de lechugas van a poder ser comparables en los intervalos de concentraciones planteadas en el experimento de 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$. De esta manera podemos observar cómo influyen las propiedades fisicoquímicas de los CE en la absorción de los mismos por las raíces de las lechugas y su posterior translocación a la parte aérea de las mismas.

5.4. RECOLECCIÓN Y ANÁLISIS DE MUESTRAS

5.4.1. Extracción y análisis con el UPLC

Al finalizar los dos experimentos, las plantas de cada variedad se seleccionaron al azar y se recolectaron desde la fila del medio (para evitar el efecto de borde) para posteriormente ser analizadas las raíces y las hojas.

La recolección se realizó con sumo cuidado para retirar las plantas de las bolsas de sustrato de la fibra de coco, sacando la planta por completo de las bolsas. Esta operación fue crítica para no perder ninguna raíz en las bolsas del sustrato y afectara negativamente a los resultados de los análisis de la parte de la raíz. En la siguiente imagen (Figura 24), se puede observar cómo sale la raíz de las bolsas del sustrato de fibra de coco.



Figura 24. Detalle de la forma de las raíces del cultivo en el momento de retirar la bolsa del sustrato de fibra de coco. Fuente: elaboración propia

Una vez retirada las bolsas del sustrato de fibra de coco, se procedió a separar las raíces del sustrato con abundante agua para realizar la operación con más facilidad y no perder ninguna raíz en el sustrato (Figura 25).



Figura 25. Detalle de las raíces de una planta de lechuga en el sustrato de fibra de coco.
Fuente: elaboración propia

Con las raíces prácticamente limpias del sustrato, las muestras vegetales se llevaron al laboratorio, donde se completó la limpieza de las raíces y se lavaron esta vez con agua desionizada para terminar de eliminar las partículas adheridas (Figura 26).



Figura 26. Detalle de la recolección de las muestras vegetales para su posterior análisis. Fuente: elaboración propia

Una vez limpias de cualquier elemento extraño, las raíces y las hojas se cortaron en trozos pequeños, se liofilizaron y se almacenaron a -20°C hasta su posterior análisis. A continuación, las muestras se molieron hasta obtener un polvo fino con un mortero de porcelana realizándose según el procedimiento descrito en Wu et al. (2013).

La metodología de extracción del tejido vegetal de los diferentes cultivos se realizó siguiendo la siguiente metodología (Wu et al., 2012b):

Se colocaron 0,2 g de muestra vegetal en un tubo de centrifuga de vidrio de 50 ml y se adicionaron los CEs como sustitutos de recuperación. Posteriormente se extrajeron con 20 ml de éter metil tert-butílico en un baño ultrasónico (50/60 Hz) durante 20 min y se centrifugó a 3.000 rpm durante 20 min (Figura 27).

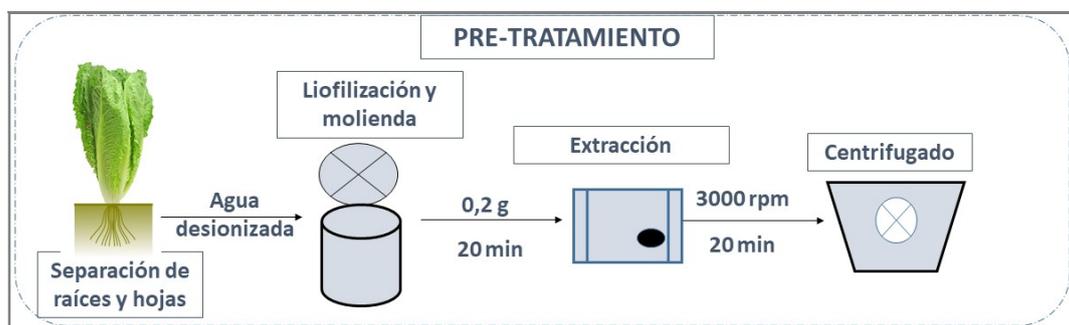


Figura 27. Pretratamiento en la extracción del tejido vegetal. Fuente: elaboración propia

Posteriormente se decantó en un vial de vidrio de 40 ml y el residuo se extrajo usando 20 ml de acetonitrilo. Los extractos combinados se secaron en nitrógeno a 30°C y se disolvieron en 1 ml de metanol, seguido de la adición de 20 ml de agua desionizada. La solución acuosa se cargó en un cartucho de equilibrio hidrófilo-lipófilo (Oasis HLB; 60 mg, 3 ml; cartuchos de extracción de Waters Corporation, Dublín, Irlanda) y se preconditionó con 5 ml de metil tert-butil éter, 5 ml de metanol y 5 ml desionizada agua. Una vez realizada esta operación, las muestras se cargaron en los cartuchos a 15 ml/min, después de lo cual los cartuchos se enjuagaron con 5 ml de agua de reactivo y luego se secaron durante 30 minutos. A continuación, los cartuchos se eluyeron con 5 ml de metanol seguido de 5 ml de metanol/MTBE 10/90 (v / v) en tubos de centrifuga calibrados de 15 ml. El extracto resultante se concentró hasta la sequedad con una corriente suave de nitrógeno. El extracto se llevó a un volumen final de 1 ml con metanol. Finalmente, las muestras se filtraron mediante filtros de nylon (25 mm, 0,45 µm de tamaño de poro) antes del análisis instrumental.

Las muestras se analizaron con un sistema Acquity UPLC I-Class y HR-QTOF-MS maXis Series (Bruker Daltonik GmbH, alemán), según lo descrito por Martínez-Alcalá et al. (2017). En la siguiente figura (Figura 28), se puede ver esquemáticamente como se realizó la metodología de extracción del tejido vegetal de los diferentes cultivos estudiados en los dos experimentos planteados con los equipos empleados,

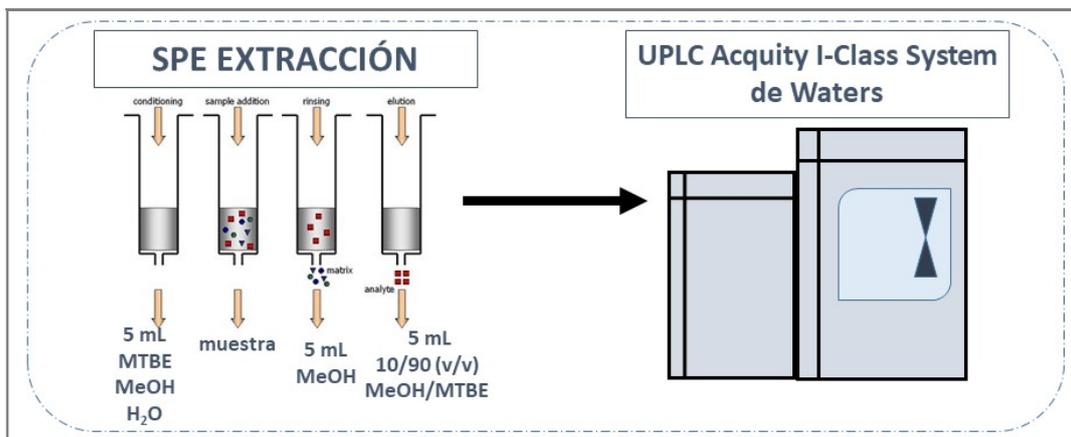


Figura 28. Metodología y equipos utilizados en la extracción del tejido vegetal. Fuente: elaboración propia

5.4.2. Control de calidad

Las recuperaciones de extracción para los productos diana se determinaron en el agua y en los tejidos vegetales mediante la adición de muestras ($n = 3$) a $100 \mu\text{g L}^{-1}$. Las recuperaciones se determinaron comparando un duplicado enriquecido de la muestra antes y después del procedimiento de extracción en la fase sólida y se calculó mediante la calibración del estándar interno. Además, se analizaron duplicados de muestras no enriquecidas para determinar las concentraciones. En los anexos en las tablas S3 y S4 se muestran los límites de detección (LOD) y los límites de cuantificación (LOQ) de los compuestos farmacéuticos en los efluentes de la EDAR y tejido vegetal.

5.5. ANÁLISIS ESTADÍSTICO

Los análisis estadísticos se llevaron a cabo utilizando el paquete estadístico SPSS (SPSS v.15.0). En los anexos en la tabla S7 muestra los coeficientes de regresión lineal entre la dosis aplicada de CE y la concentración encontrada en cada compartimento.

5.6. CALIBRACIÓN Y PREDICCIÓN CON MODELOS DE REDES NEURONALES

5.6.1. Sistema experto inteligente basado en redes neuronales

Las redes neuronales (FFNNs) se han aplicado con éxito en muchas áreas científicas, sin embargo, una de sus desventajas más importantes es que los procedimientos de “aprendizaje” tradicionales no resulta una implementación eficiente y rápida. Dentro de las redes neuronales, tenemos la máquina de aprendizaje extremo (ELM) que es un algoritmo eficiente para una sola capa oculta FFNN (SLFN). Este método tiende a proporcionar un buen rendimiento de generalización a velocidades de aprendizaje extremadamente rápidas. El algoritmo ELM se basa en el concepto de que si los valores de entrada y los sesgos de capa oculta de los SLFN se asignan aleatoriamente, entonces un SLFN se puede considerar como un sistema lineal y los pesos de salida SLFN se pueden determinar analíticamente mediante operación inversa generalizada simple del oculto matrices de salida de capa. (Huang et al., 2006; Huang, 2014). La función de activación más popular es la función sigmoidea y, en este caso, el SLFN es ampliamente conocido como perceptrón multicapa (MLP).

El algoritmo ELM se puede escribir como $\mathbf{HB} = \mathbf{T}$, donde \mathbf{H} es la matriz de salida de la capa oculta del SLFN; la i -ésima columna de \mathbf{H} es la i -ésima salida neuronal oculta con respecto a las entradas x_1, x_2, \dots, x_N . El peso óptimo de la capa de salida es $\mathbf{W} = \mathbf{H}^\dagger \mathbf{T}$, donde \mathbf{H}^\dagger es la matriz pseudoinversa Moore-Penrose (Serre, 2002). El ELM necesita reparar el número de neuronas ocultas para obtener una buena capacidad de generalización. Para evitar una búsqueda exhaustiva del valor óptimo de las neuronas en la capa oculta, la más comúnmente utilizada es ELM optimizado (OP-ELM) (Miche et al., 2010). El OP-ELM establece un número inicial muy alto de neuronas ocultas y utiliza un algoritmo de regresión de ángulo mínimo (LARS) (Simila y Tikka, 2005) para ordenar las neuronas según su importancia con el fin de resolver $\mathbf{HB} = \mathbf{T}$.

5.6.2. Predicción de absorción de CBZ y DCF realizados en un modelo de simulación SEI basado en redes neuronales

Tomando como referencia los resultados obtenidos en el experimento realizado en lechugas que se regaron con una mezcla de CBZ y DCF a diferentes concentraciones, se calibró este modelo de predicción con el objetivo de predecir la acumulación de CBZ y DCF en las hojas y raíces de las lechugas. En este sistema no se tiene en cuenta ningún parámetro que pueda influir en la absorción de los CEs en las hojas y raíces de las lechugas. Se ha ido alimentando una red neuronal y se ha estado enseñando como se comportaría con los resultados obtenidos con la concentración de CEs en el agua de riego. Este modelo de predicción es muy simple y en él no influyen otros parámetros tales como las condiciones ambientales, ciclo de cultivo, día de exposición al agua de riego con CEs, transpiración, tipo de sustrato, Tan solo se puede cambiar la variable concentración de los CEs en el agua de riego para poder obtener unos valores estimados de absorción de CEs en los tejidos de las plantas con una aproximación aceptable. Este modelo es muy útil y nos sirve para poder sacar diferentes conclusiones siempre y cuando se repliquen las mismas condiciones a las que estuvo expuesto el cultivo de donde se sacaron los valores observados. Otra característica de este modelo es que la predicción es aceptable siempre y cuando los valores que introducimos en el modelo estén dentro del rango de las concentraciones de CEs a las que fueron regadas las lechugas, es decir, entre 30 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$ (recordamos que las lechugas fueron regadas con una mezcla de CEs en el agua de riego de 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$. Ver Apartado 5.3.2.).

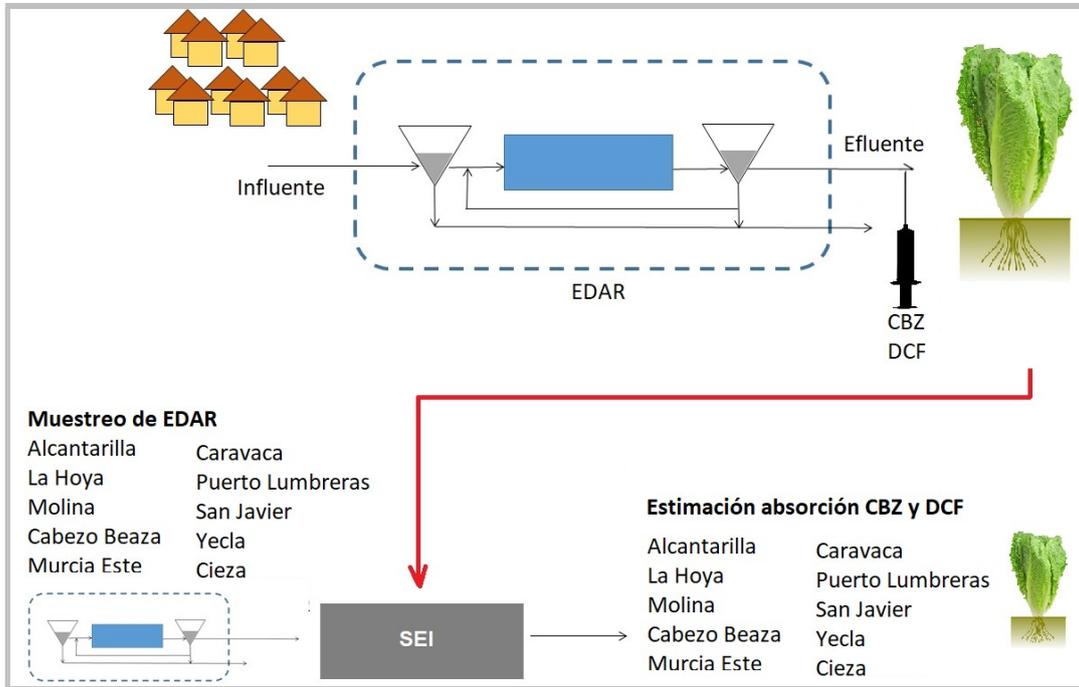


Figura 29. Esquema de diseño de la predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechuga en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia con el modelo SEI. Fuente: elaboración propia

Tal y como podemos ver en la figura anterior (Figura 29) para calibrar el modelo de simulación SEI, se ha basado en los valores obtenidos en el segundo experimento de tal forma que han servido al modelo para “aprender” cómo se comportan los CE experimentados en el interior de la planta. De esta forma podemos predecir la absorción de los CE en los tejidos de las lechugas (hojas y raíces) a concentraciones diferentes a las experimentadas con lo que nos permite un ahorro de costes de toma de muestras, laboratorio y reducción de la contaminación ambiental, debido a la cantidad de compuestos orgánicos que hay que utilizar en el análisis de estos CE.

De esta manera, se ha realizado una calibración para la absorción de los CE en lechugas tomando como referencia los efluentes de 10 EDAR representativas de la Región de Murcia realizadas en un estudio previo en Fernández-López et al. (2016). La concentración de CE en los efluentes de las EDAR representativas se puede ver en la siguiente tabla:

Tabla 8. Tabla de concentraciones medias ($\mu\text{g L}^{-1}$) de los CEs en los efluentes de la EDAR objeto de estudio

EDAR	CBZ ^a	DCF ^a
Alcantarilla (AL)	11,87	0,39
La Hoya - Lorca (LH)	10,37	0,53
Molina de Segura (MN)	< 0,012	< 0,012
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	1,45	<0,01
Murcia Este (ME)	2,47	0,38
Caravaca de la Cruz (CC)	2,40	< 0,012
Puerto Lumbreras (PL)	14,10	< 0,012
San Javier (SJ)	2,02	< 0,012
Yecla (Y)	6,22	< 0,012
Cieza (Ci)	< 0,012	< 0,012

^a Fernández-López et al., 2016.

Se han introducido en el modelo los valores de los efluentes de las EDAR para modelizar y obtener una predicción de concentración de CEs en las lechugas si se utilizaran dichos efluentes en el riego de dicho cultivo. Esto nos permite valorar si las concentraciones de los efluentes de las EDAR son altas desde el punto de vista del riesgo humano por incorporación a la cadena alimentaria al consumir la parte comestible de las lechugas.

A partir de los datos mostrados en la anterior tabla se representaron dos mapas con los valores de los efluentes tomados para preparar la calibración de la predicción en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia. En las siguientes figuras (Figuras 30 y 31) podemos ver la distribución espacial de los CEs en los efluentes de las EDAR.

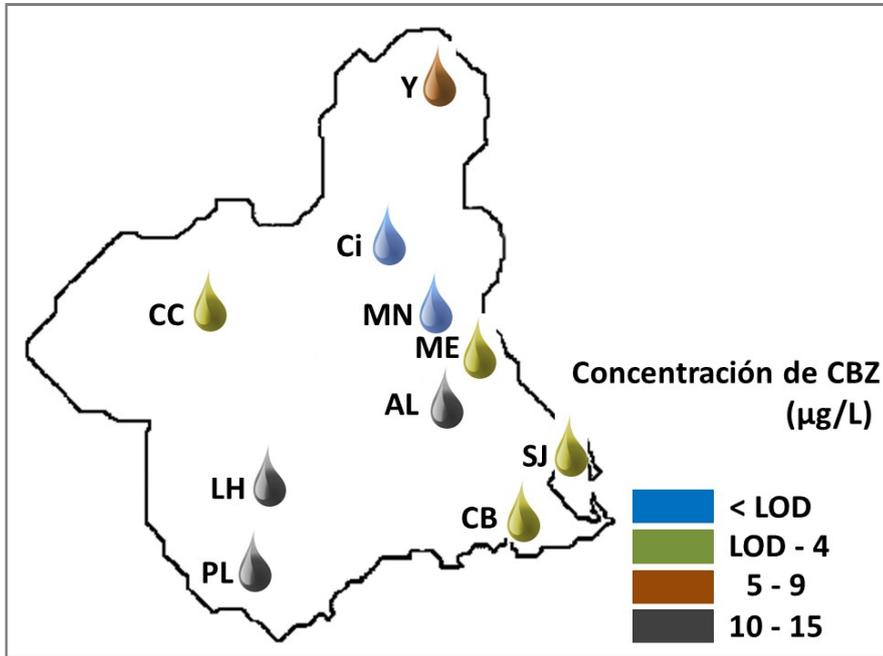


Figura 30. Mapa de la distribución geográfica de CBZ en los efluentes de las EDAR estudiadas en la Región de Murcia. Fuente: Elaboración propia

Como se puede observar en el mapa (Figura 30) realizado a partir de los datos obtenidos de las concentraciones medias ($\mu\text{g L}^{-1}$) de los CE en los efluentes de las EDAR objeto de estudio (Fernández-López et al., 2016), las EDAR con mayor concentración de CBZ detectada en el efluente son las EDAR de Puerto Lumbreras, La Hoya y Alcantarilla (Tabla 8). Por el contrario, las EDAR en las cuales no se detectó CBZ fueron las EDAR de Cieza y Molina. Las EDAR de Yecla, Caravaca, Murcia Este, San Javier y Cabezo Beaza se encontrarían en un término medio.

En el caso del DCF, tal y como se puede ver en el mapa representado en la Figura 31, las concentraciones detectadas de CE en los efluentes de las EDAR estudiadas fueron menores que con la CBZ. Las EDAR donde se detectaron una baja concentración de CE fueron en La Hoya, Alcantarilla y Murcia Este. Si comparamos las dos primeras EDAR (La Hoya y Alcantarilla) coincide con dos de las EDAR donde se detectó mayor concentración de CBZ en el efluente.

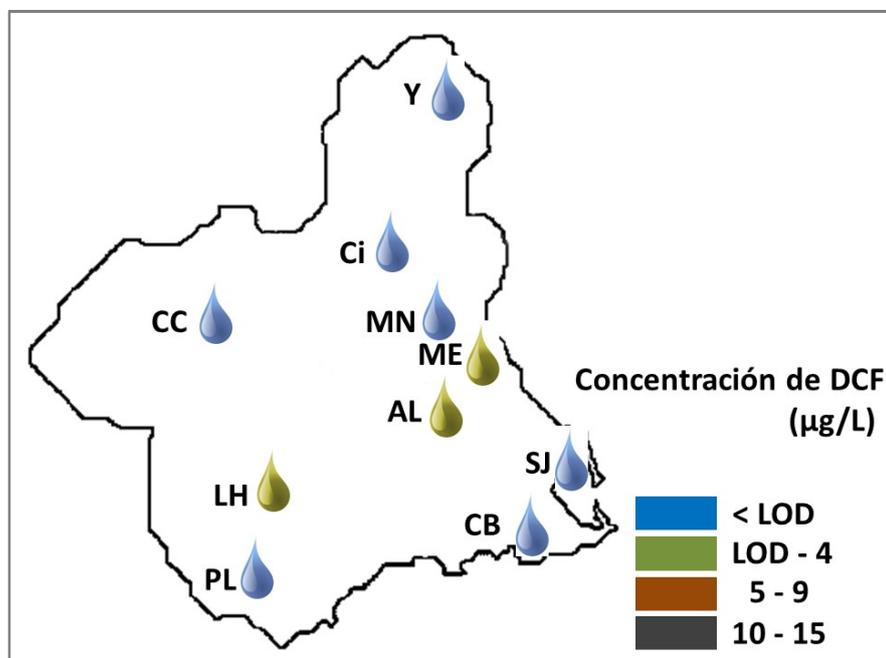


Figura 31. Mapa de la distribución geográfica de DCF en los efluentes de las EDAR estudiadas en la Región de Murcia. Fuente: Elaboración propia

En la Tabla 9 se pueden ver los datos de la población servida y la población equivalente de las EDAR objeto de estudio.

Tabla 9. Tabla de la población servida y la población equivalente en las EDAR objeto de estudio

EDAR	Población servida ^a	Población equivalente ^a
Alcantarilla (AL)	40.619,00	72.034,00
La Hoya - Lorca (LH)	69.418,00	109.245,00
Molina de Segura (MN)	66.224,00	188.800,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	176.705,00	135.381,00
Murcia Este (ME)	365.773,00	458.561,00
Caravaca de la Cruz (CC)	24.434,00	29.550,00
Puerto Lumbreras (PL)	12.279,00	11.876,00
San Javier (SJ)	27.872,00	19.146,00
Yecla (Y)	31.723,00	37.655,00
Cieza (Ci)	34.097,00	58.593,00

^a Datos obtenidos de ESAMUR. Página web oficial <http://www.esamur.com/mapa-de-edar>

5.6.3. Calibración del modelo de simulación SEI basado en redes neuronales

Utilizando los datos de CBZ y DCF recopilados del segundo experimento descrito anteriormente, se calibró el modelo de simulación SEI basado en la técnica ELM. Se desarrollaron varios experimentos para realizar la calibración. En primer lugar, se analizó la cantidad de entradas de sistema inteligentes necesarias para obtener los resultados más precisos posibles. Luego se intentó determinar la técnica más apropiada para realizar la simulación. Finalmente, se estudió la posible acumulación de CBZ y DCF en lechugas si fueran regadas con aguas residuales de las EDAR seleccionadas en la Región de Murcia.

Se llevó a cabo una validación cruzada en todos los experimentos para garantizar la calidad y la solidez de los resultados. Esta validación cruzada consistió en entrenar la técnica ELM utilizando todos los datos disponibles, excepto en una hipótesis que se usó para las pruebas, y luego repetir este proceso hasta que todas las hipótesis se utilizaron para la prueba. La medida utilizada para evaluar el sistema propuesto fue R^2 . Este valor de R^2 se calculó con la siguiente fórmula:

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (T_i - \bar{T})(O_i - \bar{O})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (T_i - \bar{T})^2 \sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2}} \quad \text{Ec. (1)}$$

Donde:

T_i es el valor objetivo.

\bar{T} es la media de los valores de los objetivos.

O_i es el valor obtenido del ELM.

\bar{O} es la media de los valores obtenidos.

La calibración del sistema experto inteligente basado en la técnica ELM se dividió en dos procesos. Se calibró para la absorción de CBZ y DCF en las lechugas sabiendo la concentración de cada CE en el agua utilizada para regar las lechugas y su posterior acumulación en las hojas y raíces de las muestras cultivadas en el segundo experimento realizado en el invernadero. Por lo tanto, se realizaron todas las combinaciones de datos de entrada y salida para cada CE (CBZ y DCF) para determinar cuál sería el procedimiento más efectivo para minimizar la cantidad de análisis, reducir los costos y lograr una mayor precisión. Para este experimento, la técnica ELM implementó un Kernel lineal.

En las siguientes tablas (Tabla 10 y 11) se muestran la calibración del modelo de simulación SEI basado en la técnica ELM tomando dos atributos como entradas y realizando las diferentes combinaciones para DCF y CBZ, respectivamente. Se puede ver el valor de R^2 para las evaluaciones de entrenamiento y prueba.

Tabla 10. Calibración para DCF usando dos entradas en el modelo de simulación SEI

Entradas	Salidas		Entrenamiento R^2	Prueba R^2
Concentración de DCF	Raíz	Hoja	0,9804	0,9642
Concentración de DCF	Hoja	Raíz	0,9681	0,9772
Hoja	Raíz	Concentración de DCF	0,9894	0,9870
Concentración de DCF	Variedad	Hoja	0,9704	0,9641
Concentración de DCF	Variedad	Raíz	0,9804	0,9772

Como se puede ver en la anterior tabla (Tabla 10), la mejor calibración para el DCF se obtiene al tomar la entrada en hojas de lechuga y raíces como entradas y en la salida la concentración de DCF en el agua de riego. Sin embargo, la calibración más interesante es aquella que puede usarse para predecir las acumulaciones en hojas y raíces. Entre estos resultados, cabe destacar las dos últimas filas de la Tabla 10 donde se obtuvo una calibración satisfactoria para predecir las acumulaciones en las hojas y raíces conociendo la concentración de DCF en el agua de riego y la variedad de lechuga.

La calibración obtenida con el modelo de simulación SEI para CBZ (Tabla 11) es bastante similar a la obtenida para DCF. En este caso, destacar que cuando se definió como entradas el uso de la variedad de lechuga y la concentración de CEs arrojaron una calibración ligeramente mejor que cuando las entradas fueron la concentración de CBZ y la concentración en las hojas y raíces. Por lo tanto, una vez analizada la calibración se observó que sólo se necesitó conocer la concentración de CEs en el agua de riego y la variedad de lechugas para predecir con precisión la acumulación de CEs en las hojas y raíces de las lechugas.

Tabla 11. Calibración para CBZ usando dos entradas en el modelo de simulación SEI

Entradas	Salidas		Entrenamiento R²	Prueba R²
Concentración de CBZ	Raíz	Hoja	0,9696	0,9613
Concentración de CBZ	Hoja	Raíz	0,9677	0,9590
Hoja	Raíz	Concentración de CBZ	0,9820	0,9781
Concentración de CBZ	Variedad	Hoja	0,9732	0,9686
Concentración de CBZ	Variedad	Raíz	0,9728	0,9662

En las siguientes tablas (Tablas 12 y 13) se muestran la calibración obtenida cuando se ha introducido un parámetro para predecir la acumulación de DCF y CBZ, respectivamente. En este caso, las mejores predicciones se obtuvieron de acumulación de CEs en hojas y raíces de las lechugas.

Tabla 12. Calibración para DCF usando una entrada en el modelo de simulación SEI

Entradas	Salidas	Entrenamiento R²	Prueba R²
Concentración de DCF	Hoja	0,9681	0,9642
Concentración de DCF	Raíz	0,9804	0,9772
Raíz	Hoja	0,9425	0,9340
Hoja	Raíz	0,9425	0,9355
Hoja	Concentración de DCF	0,9681	0,9644
Raíz	Concentración de DCF	0,9804	0,9772

Tabla 13. Calibración para CBZ usando una entrada en el modelo de simulación SEI

Entradas	Salidas	Entrenamiento R ²	Prueba R ²
Concentración de CBZ	Hoja	0,9696	0,9659
Concentración de CBZ	Raíz	0,9677	0,9622
Raíz	Hoja	0,9465	0,9359
Hoja	Raíz	0,9465	0,9381
Hoja	Concentración de CBZ	0,9696	0,9656
Raíz	Concentración de CBZ	0,9677	0,9620

Teniendo en cuenta la calibración obtenida, se validó estadísticamente y no hubo diferencias significativas entre las predicciones realizadas con dos variables o una variable en la entrada en el modelo de simulación SEI. Para realizar esta validación, se usó la prueba no paramétrica de rango con signo de Wilcoxon (Kruskal, 1957), que indica si hay diferencias significativas entre dos muestras de datos. Los resultados aportados por esta prueba estadística mostraron un nivel de confianza del 95% que no había diferencias significativas entre la creación de un modelo de simulación SEI con una o dos entradas. Por lo tanto, y evaluando los objetivos propuestos, el modelo de simulación SEI fue calibrado con una sola entrada.

Una vez adoptado el criterio de calibrar el modelo de simulación SEI con una sola entrada, se analizó la técnica ELM para evaluar si el modelo lineal era la mejor opción para predecir la acumulación de CBZ y DCF en hojas y raíces de lechuga. Se usaron núcleos gaussianos y sigmoidales, se inicializaron aleatoriamente y se repitió el experimento treinta veces para obtener unos valores estables y robustos. En las siguientes tablas 14 y 15 se muestran la calibración obtenida usando los núcleos gaussianos y sigmoidales.

Tabla 14. Calibración para CBZ utilizando núcleos gaussianos y sigmoideos

Entradas	Salidas	Test CBZ Gaussiano Kernel		Test CBZ Sigmoideo Kernel	
		R ²	STD	R ²	STD
Raíz	Hoja	0,9614	0,0035	0,9520	0,0073
Hoja	Raíz	0,9301	0,0059	0,9371	0,0107
Concentración de CBZ	Hoja	0,9406	0,0065	0,9627	0,0050
Concentración de CBZ	Raíz	0,9113	0,0115	0,9610	0,0029

Tabla 15. Calibración para DCF utilizando núcleos gaussianos y sigmoideos

Entradas	Salidas	Test CBZ Gaussiano Kernel		Test CBZ Sigmoideo Kernel	
		R ²	STD	R ²	STD
Raíz	Hoja	0,9408	0,0083	0,9390	0,0101
Hoja	Raíz	0,9329	0,0060	0,9360	0,0159
Concentración de DCF	Hoja	0,9375	0,0098	0,9677	0,9696
Concentración de DCF	Raíz	0,9459	0,0074	0,0039	0,0042

En las siguientes figuras (Figuras 32 y 33) se muestran las representaciones gráficas de las calibraciones para las predicciones obtenidas para la acumulación de CEs en las hojas y raíces al tomar las concentraciones de agua de riego de CBZ y DCF, respectivamente en las entradas de datos. Analizando las dos gráficas se desprende que las diferencias entre los núcleos lineales y sigmoidales son mínimas. Sin embargo, estadísticamente, al aplicar la prueba de rango con signo de Wilcoxon por parejas, no hubo diferencias significativas entre ninguno de los tres núcleos. Por lo tanto, se calibró el modelo de simulación SEI utilizando el kernel lineal y tomando la concentración de los CEs en la entrada del modelo de simulación SEI y la acumulación de CBZ y DCF en las hojas y raíces en la salida; dado que no hubo diferencias significativas se usó el kernel más sencillo.

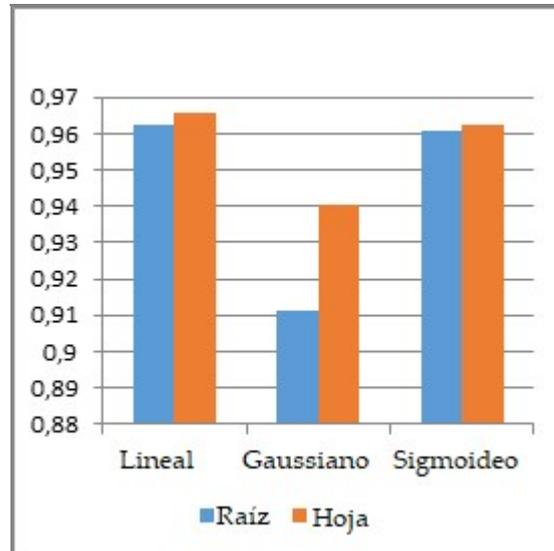


Figura 32. Diagrama de las calibraciones de las representaciones gráficas de las predicciones obtenidas para la acumulación de CBZ en las hojas y raíces de las lechugas. Fuente: elaboración propia

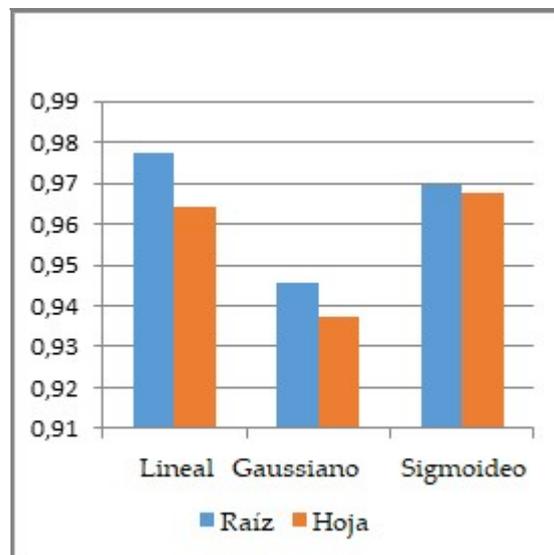


Figura 33. Diagrama de las calibraciones de las representaciones gráficas de las predicciones obtenidas para la acumulación de DCF en las hojas y raíces de las lechugas. Fuente: elaboración propia

5.7. CALIBRACIÓN Y PREDICCIÓN CON EL MODELO DE SIMULACIÓN NPUM

La absorción de CE's en las plantas puede generar residuos que son un peligro para la salud humana y los ecosistemas. Existe un gran interés en la predicción de la cantidad de CE's absorbidos por las plantas.

Los modelos de captación de plantas para CE's, como pesticidas y productos farmacéuticos, contienen muchos parámetros que son medidos de experimentos y son variables en el tiempo. Por lo tanto, los modelos generalmente no predicen las concentraciones exactas, pero se aproximan en un porcentaje muy alto de predicción. El software se distribuye bajo una licencia gratuita y el código está abierto lo que permite realizar cambios según las necesidades.

Los procesos fisiológicos dentro de las plantas y el metabolismo primario y secundario involucran químicos, que son transportados a través de las membranas y el sistema vascular de las plantas. Las plantas han desarrollado sistemas de transporte especiales para productos químicos esenciales en su metabolismo.

5.7.1. Explicación del sistema de absorción de compuestos en las plantas.

El sistema planta está constituido por raíces, tallos, hojas, flores y frutas. Mientras que la función de las raíces es anclar la planta en el suelo y absorber agua y nutrientes, el papel de los tallos es transportar el agua hacia arriba y servir de soporte a las hojas. A su vez, el papel de las hojas es captar la luz solar y CO₂, y realizar la fotosíntesis. Así, cuando la planta absorbe el dióxido de carbono de la atmósfera, el agua se evapora. Solo una fracción muy pequeña (<2%) del agua absorbida por las raíces se absorbe realmente en las células vegetales. Las plantas vasculares, tienen dos sistemas de transporte en el interior: el xilema y el floema. En el xilema el agua es atraída hacia arriba por fuerzas físicas, mientras que en el floema el flujo va desde las hojas hasta las diferentes partes de la planta y hasta los frutos. Las plantas extraen agua y nutrientes del suelo e intercambian gases con el aire y además permiten el paso de los productos químicos en el interior de la planta. Se realizan varios procesos de captación simultáneamente en el interior de la planta, tales como: absorción del agua del suelo y translocación en el xilema; difusión en fase de gas o agua en las raíces; contacto directo con el suelo; transporte de floema; flujo de gas fuera del suelo y dentro del tejido aéreo; intercambio directo con el aire.

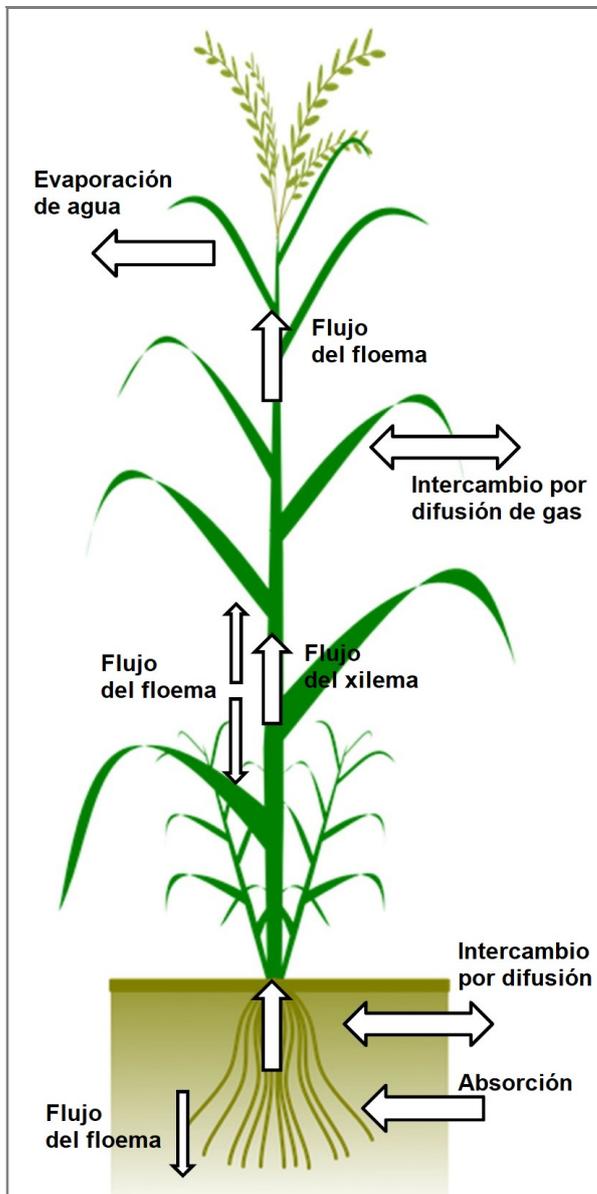


Figura 34. Procesos de absorción y transporte en la planta. Fuente: elaboración propia

5.7.2. Modelo de simulación NPUM

Este modelo de predicción de absorción de compuestos químicos desarrollado por la DTU se basa en que todos los procesos son "pasivos", es decir, que la planta no agrega energía para mover los compuestos químicos. Los procesos se basan en la advección (con el flujo de agua), difusión y el equilibrio (la partición).

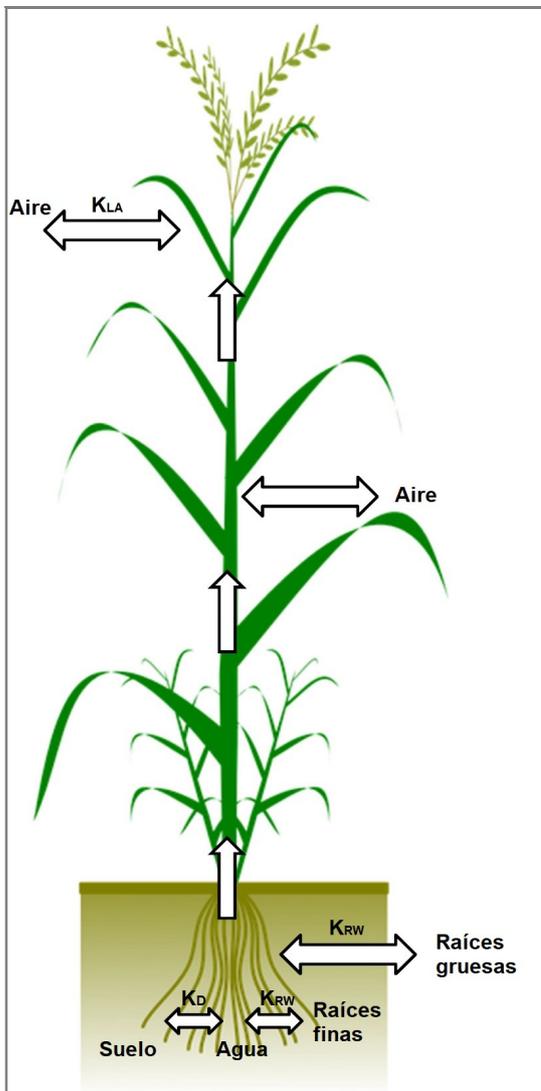


Figura 35. Principio del modelo de predicción de absorción de compuestos químicos NPUM. Fuente: elaboración propia

A continuación, vamos a profundizar como aborda los diferentes procesos este modelo de simulación.

Partimos del equilibrio en el suelo en el que cualquier compuesto químico puede estar adsorbido en la matriz del suelo o en el agua del suelo. Solo una fracción del compuesto químico en el agua del suelo es móvil y puede ser captado (en el gas no lo consideramos porque es irrelevante). La distribución entre el agua intersticial del suelo y los sólidos del suelo se conoce como K_d que es el coeficiente de distribución ($\text{mg kg}^{-1} : \text{mg L}^{-1} = \text{L kg}^{-1}$). En el modelo se usa el K_d para calcular el K_{sw} o coeficiente de partición (total) del suelo al agua. A continuación, la raíz absorbe el agua y las sustancias que están disueltas en el agua. Cuando las sustancias cruzan la membrana de la raíz celular, estas sustancias disueltas en el agua del suelo se mueven hacia las raíces más finas. Estas raíces finas, son pelos y puntas de raíz con una superficie enorme que permite el intercambio de sustancias. El agua fluye de las raíces finas hacia las más gruesas, y lo transportan hacia el xilema. En la entrada, la savia del xilema se equilibra con las raíces finas y en el flujo de salida, la savia del xilema se equilibra con las raíces gruesas, y la relación de concentración se calcula mediante el coeficiente de partición raíz a agua K_{RW} .

Un proceso similar sucede en el tallo con la peculiaridad que éste tiene contacto con el aire y pueden conducir a la pérdida de la absorción de los compuestos. Todo lo que no se retiene en el tallo se transporta a las hojas (con el xilema) o a las frutas (con el xilema y el floema). El xilema y el floema se equilibran y tienen la misma concentración de las sustancias, a excepción de los compuestos muy polares que tienen una movilidad limitada a través de las membranas celulares.

Además, hay que tener en cuenta que la absorción de agua y la transpiración se combinan con la eficiencia del uso del agua para el crecimiento de las plantas y que las células vegetales pueden metabolizar los compuestos químicos al alcance de las enzimas. Este comportamiento se explica mediante la cinética de Michaelis-Menten.

5.7.3. Absorción de compuestos orgánicos en las raíces

La absorción de compuestos orgánicos en las raíces depende de las propiedades de los productos químicos y de las plantas. La absorción es bastante rápida hasta que se alcanza el equilibrio definido por el factor de concentración de raíz RCF (Trapp, 2000):

$$RCF = \frac{\text{Concentración en raíces (g g}^{-1}\text{)}}{\text{Concentración en la solución (g ml}^{-1}\text{)}} \quad \text{Ec. (2)}$$

Briggs et al. (1982) pulverizaron raíces de cebada y realizaron experimentos mezclando agua con productos químicos de diferentes K_{ow} . El valor de RCF aumenta con el valor de K_{ow} (K_{ow} es el coeficiente de partición entre octanol y agua) tal y como se puede ver en la siguiente gráfica:

$$RCF = 0,82 + 0,03 K_{ow}^{0,77} \quad \text{(Trapp, 2004)} \quad \text{Ec. (3)}$$

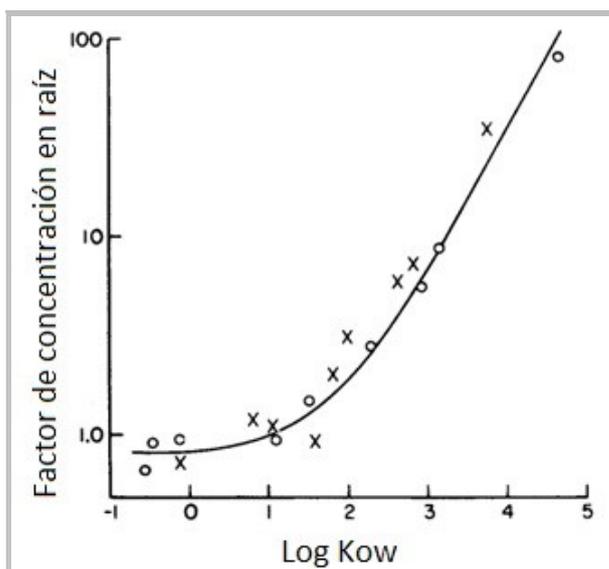


Figura 36. Relación entre la absorción de productos químicos por las raíces de las plantas (expresado como RCF) y sus coeficientes de partición entre octanol y agua (Log K_{ow}). Fuente: adaptado de Briggs et al., 1982

Partiendo del valor del RCF obtenemos el K_{RW} (coeficiente de partición raíz a agua) ($L \text{ kg}^{-1}$), que es el reparto de equilibrio entre la concentración de raíz CR (mg kg^{-1} de peso fresco⁻¹) y el agua CW (mg L^{-1}).

$$K_{RW} = W_R + L_R a K_{OW}^b + P_A(\text{root}) K_{AW} \text{ (Trapp, 2000)} \quad \text{Ec. (4)}$$

Donde:

W_R es el contenido de agua en raíz (L kg⁻¹).

L_R es el contenido de lípidos en raíz (kg kg⁻¹).

P_A son los poros de aire en raíz (L kg⁻¹).

La siguiente ecuación (Trapp, 2009) calcula la absorción de compuestos químicos en la raíz con la transpiración del agua.

$$\frac{dm_R}{dt} = C_W \times Q - C_{XY} \times Q \quad \text{Ec. (5)}$$

Donde:

M_R es la masa de la sustancia química en las raíces.

Q es la corriente de transpiración (L d⁻¹).

C_{XY} es la concentración en el xilema a la salida de la raíz (mg L⁻¹).

Para calcular el cambio de concentración de compuestos en las raíces (C_R , mg kg⁻¹) con el tiempo t (d) el modelo se basa en la siguiente ecuación (Hurtado et al., 2016):

$$\frac{dC_R}{dt} = \frac{Q}{M_R} \times \frac{C_S}{K_d} - \frac{Q}{M_R \times K_{RW}} \times C_R - k_{\text{growth},R} \times C_R - \text{degradatio} \quad \text{Ec. (6)}$$

Donde:

R es el índice de raíces.

Q es la transpiración (L d⁻¹).

M es la masa de la planta (kg).

C_S es la concentración de compuestos químicos en el suelo (mg kg⁻¹).

K_d coeficiente de distribución entre sustrato y agua en los poros del mismo (L kg⁻¹).

K_{RW} es el coeficiente de partición de raíz a agua (L kg⁻¹).

$K_{\text{growth},R}$ es el índice de crecimiento de las raíces (d⁻¹)

5.7.4. Absorción de compuestos orgánicos en las brotes

Para pasar desde el suelo hasta el xilema, donde el agua se transloca hacia arriba, el agua debe atravesar una celda (una biomembrana) llamada "Banda de Caspary". Esta banda, que separa la raíz externa ("corteza") de la raíz interna, es una banda cerosa. Solo los productos químicos lipofílicos la pueden atravesar. A través de las biomembranas el agua puede pasar rápidamente (esto es facilitado por difusión). Los productos químicos necesitan difundirse a través de las biomembranas.

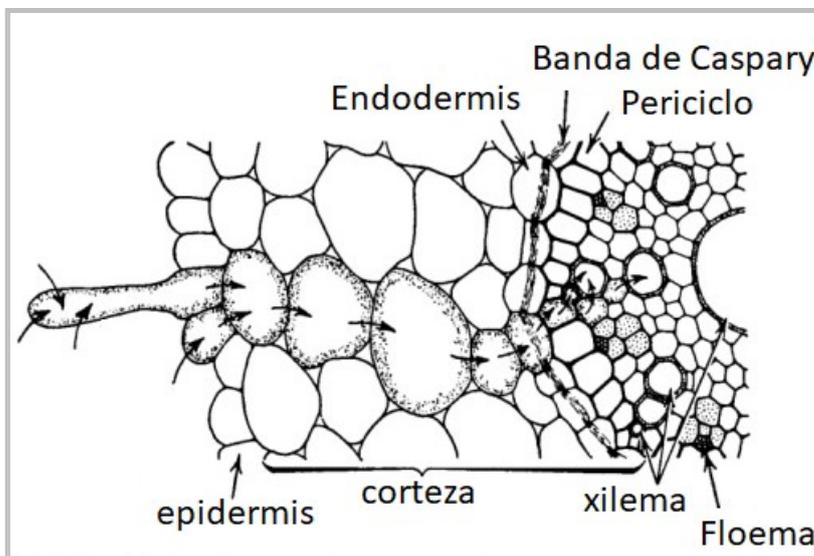


Figura 37. Sección transversal de raíz que muestra las posibles rutas de agua y movimiento de solutos en el interior de la planta. Fuente: adaptado de Esau, (1958)

El agua cuando es absorbida por las raíces se transloca en el xilema hacia los brotes y las hojas donde se evapora. Solo el 1-2% se absorbe en las células de la planta. Los productos químicos, que se disuelven en la "corriente de transpiración" (savia del xilema), también se pueden mover hacia arriba.

El TSCF representa la relación entre la concentración en la savia de xilema y la solución externa (agua del suelo).

La translocación de compuestos a los brotes se calcula mediante TSCF (Factor de concentración de la corriente de transpiración) (Trapp, 2004):

$$\text{TSCF} = \frac{\text{Concentración en la savia del xilema (kg m}^{-3}\text{)}}{\text{Concentration en la solución (kg m}^{-3}\text{)}}$$

Ec. (7)

Cuando no se puede medir directamente, el TSCF se determina experimentalmente a partir de la masa translocada a los brotes (Trapp, 2000):

$$\text{TSCF} = \frac{\text{Cantidad en los brotes (g)}}{\text{Concentración en la solución } \text{g ml}^{-1} \times \text{volumen de agua transpirada (ml)}}$$

Ec. (8)

El TSCF se puede calcular con a partir de otras ecuaciones como se puede ver a continuación:

Dettenmaier et al. (2009):

$$\text{TSCF} = \frac{11}{11 + 2.6^{\log K_{OW}}}$$

Ec. (9)

Briggs et al. (1982):

$$\text{TSCF} = 0.734 \times \exp \left\{ \frac{-(\log K_{OW} - 1.78)^2}{2.44} \right\}$$

Ec. (10)

Burken y Schnoor (1998):

$$\text{TSCF} = 0.756 \times \exp \left\{ \frac{-(\log K_{OW} - 2.50)^2}{2.58} \right\}$$

Ec. (11)

Si tenemos en cuenta la aproximación en el cálculo de las ecuaciones anteriormente descritas, podemos ver en la siguiente gráfica la comparación entre ambas:

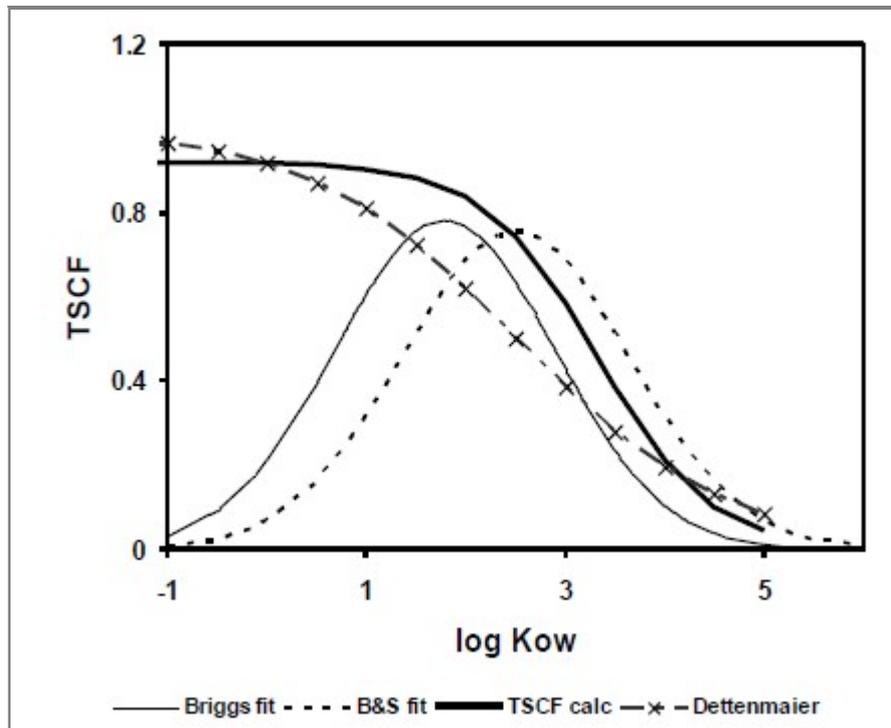


Figura 38. Comparación de TSCF empírico y calculado. Fuente: Trapp y Matthies, 1997

Tal y como se puede ver en la gráfica (Figura 38), en el cálculo con las ecuaciones de Briggs et al. (1982) y de Burken y Schnoor (1998) las curvas disminuyen cuando el Log K_{ow} < 2.

Este planteamiento es importante cuando no hay degradación del compuesto de los brotes en la medición, en caso contrario tenemos que aplicar una corrección en los parámetros de la ecuación. La translocación de los productos químicos neutros es más efectiva para compuestos con una lipofilia intermedia. El RCF y el TSCF de los electrolitos dependen del pH en la solución externa. Esto se debe a las diferencias de pH entre la solución externa y las células vegetales. La absorción de bases débiles aumenta con el pH externo, y la absorción de ácidos débiles disminuye. Los procesos más importantes que se tienen en cuenta a la hora de desarrollar este modelo de predicción son la absorción en las raíces y la translocación a los brotes de compuestos neutros y disociantes. (Acumulación de un producto químico debido al potencial eléctrico en la membrana, el mecanismo de

trampa de iones, sorción lipófila, dilución por crecimiento y advección en el sistema vascular).

5.7.5. Absorción de compuestos orgánicos en las hojas

Las hojas tienen una función intercambio de gases con el aire y uno de los factores que influye en ese intercambio es la superficie de estas. Los productos químicos presentes en el aire pueden entrar en las hojas de varias maneras: deposición gaseosa a través de la cutícula; deposición de partículas secas y húmedas e intercambio gaseoso a través de los estomas.

Dentro de las hojas, tenemos la epidermis, el agua intercelular y las células más profundas que impiden el paso de los productos químicos al interior de las hojas.

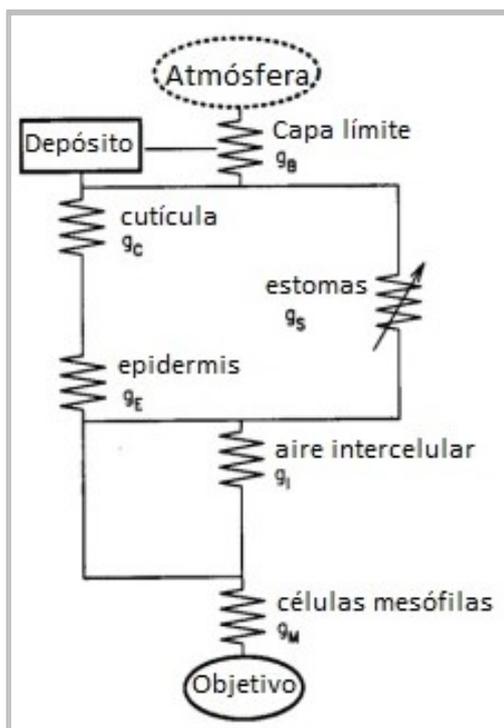


Figura 39. Red de resistencias encontradas por las moléculas orgánicas que se difunden desde el entorno al sitio objetivo dentro del mesófilo. Fuente: adaptado de Riederer (1995).

Las velocidades de deposición en todas estas rutas de absorción dependen de las propiedades químicas y ambientales. Una estimación aproximada (que se usa por defecto para los gases y las partículas) es que la velocidad de deposición de las hojas al aire, la

conductancia g , es de aproximadamente 10^{-3} m s^{-1} para la deposición gaseosa (Riederer, 1995).

El equilibrio difusivo entre las hojas y el aire se alcanza cuando se cumple la siguiente ecuación:

$$\frac{C_L}{C_{Air}} = K_{LA}/\rho$$

Ec. (12)

Dónde:

K_{LA} es el coeficiente de partición que sale al aire (mg m^{-3}).

ρ es la densidad de las hojas (kg m^{-3}).

C_L (mg kg^{-1}).

C_{Air} (mg m^{-3}).

5.7.6. Intercambio de compuestos entre las hojas y el aire

La conductancia g (m d^{-1}) es la velocidad de intercambio entre las hojas y el aire. Este valor se puede calcular a partir de varias resistencias, lo que lleva a cálculos bastante complejos. Por lo tanto, para simplificar en el modelo de predicción vamos a adoptar el valor de $86,4 \text{ m d}^{-1}$ (Trapp y Matthies, 1997). La conductancia depende de varios factores entre los que podemos citar: las propiedades del producto químico, la planta y el medio ambiente. El intercambio medido entre las hojas y el aire de los compuestos orgánicos volátiles es mucho más lento que el intercambio estimado, que es más rápido para los compuestos con alto K_{AW} a través de los estomas (Riederer, 1995). La función de los estomas es el intercambio de gases, mientras los estomas están abiertos, se absorbe dióxido de carbono y se pierde agua.

En la velocidad de intercambio entre las hojas y el aire hay tres fases diferentes que proporcionan resistencia (fase acuosa, fase lipídica y fase gaseosa), y dos vías están en paralelo (vía estomática y cuticular). Una sustancia química que está en el aire sólo tiene que superar la capa límite del aire entre la superficie de la hoja y la atmósfera para posteriormente adsorberse a la superficie de la hoja en una capa cerosa llamada cutícula. Un producto químico transportado a través de la corriente de transpiración está lejos de la cutícula debido a que la corriente de transpiración termina en el apoplasto entre las

células de la hoja, desde donde puede moverse hasta que alcanza la barrera de la cutícula o los agujeros de los estomas. En la siguiente figura podemos observar un esquema de los procesos de intercambio entre hoja y aire.

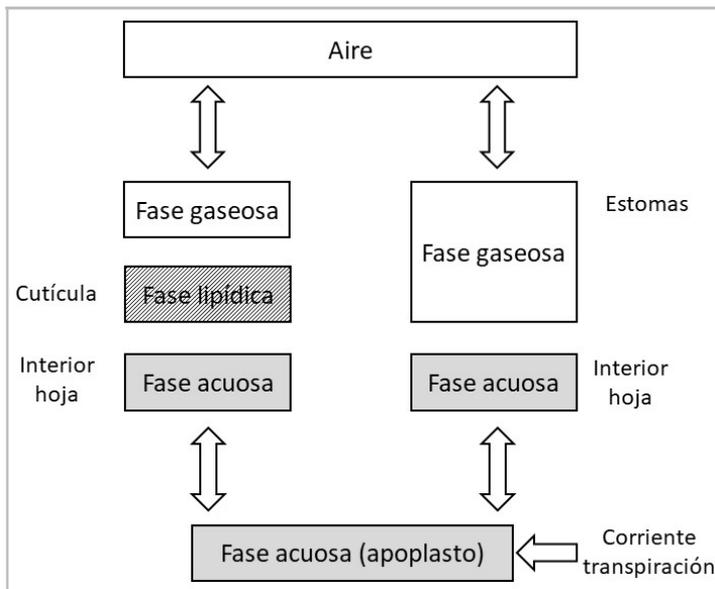


Figura 40. Representación esquemática de resistencias entre hoja y aire. Fuente: adaptado de Trapp y Matthies, 1997

En los estomas, la conductancia se puede calcular a partir de la transpiración de la planta (Trapp, 2007):

$$g_s = \frac{Q}{A \times (C_{H_2O,sat} - rh \times C_{H_2O,sat})} \times \frac{\sqrt{18}}{\sqrt{M}} \quad \text{Ec. (13)}$$

Dónde:

g (m d^{-1}).

A : superficie de la hoja (m^2).

Q : corriente de transpiración (L d^{-1}).

$C_{H_2O,sat}$: concentración de saturación de agua en el aire (kg m^{-3}).

Rh : humedad relativa (-).

M : masa molar del producto químico (g mol^{-1}).

Como el agua no necesita cruzar la capa acuosa en el apoplasto de la hoja. La permeabilidad P_{agua} (m d^{-1}) de la capa acuosa es:

$$P_{\text{agua}} = \frac{D_{O_2} \times \sqrt{32/M}}{z} \quad \text{Ec. (14)}$$

Dónde:

z : espesor de la capa acuosa en el interior de la hoja.

D_{O_2} : coeficiente de difusión de oxígeno en el agua ($1,728 \times 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ d}^{-1}$) (Trapp y Matthies, 1997).

Así, la resistencia total de la vía estomática, $g_{S, \text{total}}$, es:

$$g_{\text{Stotal}} = \frac{1}{\frac{1}{g_c} + K_{AW} / P_{\text{agua}}} \quad \text{Ec. (15)}$$

La cutícula está compuesta por una capa de ceras y su función es evitar la pérdida de agua cuando los estomas están cerrados. Un compuesto químico cuanto más lipófilo sea, mayor será su permeabilidad a través de la barrera de la cutícula (Kerler y Schönherr, 1988):

$$P_c = 10^{0,704 \times \log K_{OW} - 11,2} \quad (\text{m s}^{-1}) \quad \text{Ec. (16)}$$

La capa límite de aire, ofrece también resistencia, según podemos observar en la siguiente ecuación:

$$g_{\text{Air}} = \frac{1}{200} \times \frac{\sqrt{300}}{\sqrt{M}} \quad (\text{m s}^{-1}) \quad \text{Ec. (17)}$$

La conductancia total de la vía cuticular es:

$$g_{C\text{total}} = \frac{86400}{K_{AW}/P_C + 1/g_{Air}} \quad (\text{m d}^{-1}) \quad \text{Ec. (18)}$$

Para obtener el valor de la conductancia g general, las conductancias anteriormente calculadas, se suman. En las simulaciones que realizamos con el modelo de predicción utilizamos un valor de la conductancia $86,4 \text{ m d}^{-1}$.

Tal y como podemos ver en las ecuaciones anteriores, la permeabilidad (de la cutícula, de la capa acuosa) se divide por K_{AW} , por lo tanto, este parámetro tiene un impacto muy alto en la conductancia. Además, el $\log K_{OW}$ también influye mucho, porque la permeabilidad de la cutícula depende de la lipofilia.

El intercambio a través de la cutícula es la vía predominante para todos los compuestos bajos y semivolátiles ($K_{AW} \leq 10^{-3}$). En los compuestos poco volátiles ($K_{AW} \leq 10^{-5} \text{ L L}^{-1}$), la transferencia está limitada por la transferencia a través de la capa límite de aire y se acerca a g_{Air} (748 m d^{-1}). Los compuestos lipófilos más volátiles ($K_{AW} \geq 0,01 \text{ L L}^{-1}$) se intercambian preferiblemente a través de la ruta estomática. Para los compuestos con $\log K_{OW}=2$, la cutícula es la vía de transferencia más rápida siempre que K_{AW} tenga un valor $\leq 10^{-6} \text{ L L}^{-1}$. Con un valor de K_{AW} muy bajo (10^{-9} L L^{-1}), la capa límite de aire es de nuevo limitante. En los compuestos con una lipofilia media (K_{AW} entre 10^{-5} y $0,01 \text{ L L}^{-1}$), los estomas limitan la transferencia, y g tiene un valor de 10 m d^{-1} . En compuestos muy volátiles ($K_{AW} > 0,01 \text{ L L}^{-1}$), la capa acuosa dentro de la hoja ofrece una gran resistencia y por consiguiente la conductancia disminuye con el aumento de K_{AW} . Por tanto, en los compuestos lipófilos y con baja volatilidad, la cutícula es limitante en el intercambio, con una conductancia máxima igual a la conductancia de la capa límite de aire. Cuanto menos lipofílicos son los compuestos, más importante es la vía estomática. La resistencia en el interior de la hoja solo es importante para compuestos muy volátiles ($K_{AW} > 0,01 \text{ L L}^{-1}$), independientemente del valor de $\log K_{OW}$. El valor de $86,4 \text{ m d}^{-1}$ que adoptamos en las simulaciones que realizamos con el modelo de predicción está justificado excepto para compuestos volátiles con $K_{AW} > 0,01 \text{ L L}^{-1}$. Hay que destacar que cuando tomamos el valor aproximado de la g predeterminada para los compuestos volátiles no lipófilos no es muy relevante debido a que la exposición humana a los volátiles a través de la absorción de la planta es pequeña.

5.7.7. Preparación de los datos de entrada en el modelo de simulación NPUM

Este modelo de predicción de absorción de CEs en las plantas se basa en la fisiología de las plantas. La entrada de parámetros en el modelo es fácil y se pueden conseguir de la literatura o de datos medidos en experimentos.

La estructura de la mayoría de las plantas está formada por raíces, tallos, hojas y frutas. Además, los procesos de las plantas tienen un rendimiento similar en la extracción de CO₂ de la atmósfera y el agua del suelo. Por lo tanto, existen rangos de datos estandarizados para poder utilizarlos en la entrada de los diferentes parámetros en el modelo. Hay que tener en cuenta que, a la hora de obtener los datos para introducirlos en el modelo, estos deben coincidir en el tiempo, tomándolos en el mismo estado vegetativo de la planta.

En la siguiente tabla tenemos los valores de los principales parámetros necesarios para el modelo.

Tabla 16. Parámetros de entrada en el modelo NPUM en vegetales de hoja en 1 m²

Parámetro ^a	Valor	Unidad
Masa de la raíz	1,00	kg
Masa de los brotes	1,00	kg
Densidad de raíz	1,00	kg L ⁻¹
Área de la hoja	5,00	m ²
Densidad de brotes	500,00	kg m ⁻³
Transpiración	1,00	L d ⁻¹
Lípidos en raíces	0,02	kg kg ⁻¹
Agua en raíces	0,89	L kg ⁻¹
Lípidos en brotes	0,02	kg kg ⁻¹
Agua en brotes	0,80	L kg ⁻¹
Conductancia	86,40	m d ⁻¹
Índice crecimiento en raíces	0,10	d ⁻¹
Índice crecimiento en tallos	0,03	d ⁻¹
Tiempo hasta la recolección	60,00	d
Contenido de agua en los poros del suelo	0,35	L kg ⁻¹
Suelo adherido a las raíces	0,01-0,001	kg kg ⁻¹
Carbono orgánico del suelo	0,02	kg kg ⁻¹
Densidad seca del suelo	1,60	kg L ⁻¹

^a Trapp y Matthies, 1997

Hay que tener en cuenta que los valores no son los mismos para todas las plantas, pero en aquellos casos que se desconozca alguno de los parámetros podemos tomar como referencia los expuestos en la tabla.

5.7.8. Parametrización y valores de entrada en el modelo de simulación NPUM

La base de este modelo combina el modelo de celda para la predicción de los coeficientes de partición con un modelo de estado estacionario de raíz y raíz. El transporte de productos químicos se realiza a través del xilema desde el suelo hasta las raíces y las hojas, y a través del floema desde las hojas hasta las raíces.

Las ecuaciones planteadas en el modelo son las siguientes:

$$\frac{dC_2}{dt} = k_{12} \times C_1 - k_2 \times C_2 + k_{32} \times C_3 \quad \text{Ec. (19)}$$

$$\frac{dC_3}{dt} = k_{23} \times C_2 - k_3 \times C_3 + I \quad \text{Ec. (20)}$$

$$C_2 = \frac{(k_{12} \times k_3 \times C_1 + I \times k_{32})}{k_2 \times k_3 - k_{23} \times k_{32}} \quad \text{Ec. (21)}$$

$$C_3 = \frac{k_{23} \times C_2 + I}{k_3} \quad \text{Ec. (22)}$$

Dónde:

C1: concentración en el sustrato.

C2: concentración en las raíces.

C3: concentración en las hojas.

k₁₂: velocidad de transferencia de 1 (suelo) a 2 (raíces).

k₂: tasa de pérdida de 2 (raíces).

k₃₂: ganancia con floema de las hojas.

k₂₃: ganancia con xilema desde las raíces hasta las hojas.

k₃: pérdida total de las hojas.

El parámetro de la entrada I desde el aire, tiene un valor de cero (Hurtado et al., 2016).

El modelo está dividido en diferentes partes para introducir los parámetros de y entrada de los CEs y de las raíces y las hojas como podemos ver en las siguientes figuras (Figuras 41 y 42):

Chemical input data		
log Kow		of neutral
log Kow ion		of ion
Kaw		(m ³ :m ³)
K HSA adsorption to proteins		L/mol
K HSA change unit	0,00E+00	g/g
Molar mass M		g/mol
pKa		in water
pKa corr		1 in membranes
valency z	-1	base is +
i	-1	same as z
Metab rate		0 1/d
slope b	0,85	0.77 to 0.96
Concentration in irrigation water		microg/L
Concentration at coconut fibre		ng/g

Figura 41. Datos de entrada de las características químicas del CE en el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

Root data		
for 1 m ²		
M Root mass		kg
Q Transpiration		L/d
k growth roots		1/d
Leaves data		
for 1 m ²		
Shoot mass / volume		kg
Leaf Area		0 m ²
conductance g	1,00E-03	m/s
Transpiration	0,00E+00	L/d
Time to harvest		days
Growth rate		1/d
pH in the pot		
Ratio phloem to xylem flow	0,1	(-)
dry weight		

Figura 42. Datos de entrada de las características de los cultivos (hojas y raíces) en el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

En la Figura 43 podemos observar los coeficientes de partición del modelo:

Coefficients	Cyt Xyl	Cyt Phlo	Cyt Vac	Meaning
S1 = I1	6,28E+02	6,28E+02	6,28E+02	Input to comp 1, kg/m3/s
A2 = a12	1,44E+02	1,75E+02	4,55E+01	exchange rate 2 to 1 1/s
L1 = - a11	4,92E+01	4,92E+01	8,56E+01	loss rate 1 1/s
S2 = I2	0,00E+00	0	0,00E+00	Input to comp 2 kgm3/s
A1 = a21	3,91E+01	3,91E+01	5,06E+00	exchange rate 1 to 2 1/s
L2 = - a22	6,16E+02	7,53E+02	5,06E+00	loss rate 2 1/s
B1 = C1(0)	0,00E+00	0	0,00E+00	initial conc C1 kg/m3
B2 = C2(0)	0,00E+00	0	0,00E+00	initial conc C2 kg/m3
Terms				
r1	-39,459	-39,576	-2,294	
r2	-626,033	-762,612	-88,358	
C2ss	0,993	0,813	15,667	
F	-1,060	-0,857	-16,084	
G	0,067	0,044	0,418	
C1ss	15,667	15,667	15,667	
H	-15,650	-15,656	-8,788	
J	-0,017	-0,011	-6,879	

Figura 43. Coeficientes de partición y modelos de celda en el modelo de simulación. Fuente: elaboración propia

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots	
C1 is irrigation water	
C2 is roots	
C3 is leaves	
Differential equation	
$dC2/dt = k12 C1 - k2 C2 + k32 m3$	
$dC3/dt = k23 C2 - k3 C3 + I$	
Steady-state solution (by hand)	
$C2 = (k12 k3 C1 + I k32)/(k2 k3 - k23 k32)$	
$C3 = (k23 C2 + I)/k3$	
C irrigation water	9,68E-03
Definition of phloem flow leaves to roots, 10% of xylem	
Qp	0,04
KPL	5,19E-02
k32 (seen from root)	2,31E-02
Definition of k values	
I is uptake from air set to zero	0,00E+00
k12 (with F)	4,41E+00 1/d
k2	4,05E-01 1/d
k23	2,82E-01 1/d
k3 loss leaves	1,46E-01 1/d
C root	9,51E-02 mg/kg
C leaf	1,84E-01 fresh weight

Figura 44. Vista de los cálculos realizados por el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

En las Figuras 44 y 45, tenemos los cálculos que realiza el modelo para predecir la concentración de los CE's en los tejidos de la planta.

Calculations	
Roots k growth + k metab	0,123 1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06 1/d
Leaves all loss	1,23E-01 1/d
Partition coefficients	
Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01
KXyW xylem to water L/L	0,993
Kxy/root kg/L	6,34E-02
K Root to xylem L/kg	1,58E+01
K LW L/L	
Phloem to xylem	1,57E+01
KPhXy L/L	8,18E-01
fn in cytosol, leaves	6,38E-02
Permeability related to water (max same)	
P water m/s	2,20E-09
Calculation of concentration in pot	
Concentration in irrigation water	120 microg/L
Concentration at coconut fibre	342 ng/g
Concentration in irrigation water	0,12 mg/L
Concentration at coconut fibre	0,342 mg/kg
Kd	2,9 L/kg
volume water per pot	0,5 L
weight coconut fibre per pot	2,0 kg
Cw in the pot with cocosfibras	9,68E-03 mg/L water

Figura 45. Vista de los cálculos realizados por el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

Después de realizar los diferentes cálculos el modelo predice unos valores de concentración de CE's para los tejidos de la planta estudiados (hojas y raíces).

5.7.9. Calibración en la predicción de absorción de CBZ y DCF realizados con el modelo de simulación NPUM

Partiendo de los valores obtenidos en el experimento realizado con las tres variedades de lechugas en las que se regaron con el efluente de la EDAR al que se añadieron CBZ y DCF a las siguientes concentraciones de 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$, se calibró este modelo de predicción con el objetivo de predecir la acumulación de CBZ y DCF en los diferentes tejidos de la planta cuando se riegan las lechugas a otras concentraciones de estos CE en el agua de riego. En la siguiente figura (Figura 46), se puede ver el diseño de la predicción de CBZ y DCF con el modelo de simulación NPUM partiendo de los datos obtenidos en el segundo experimento.

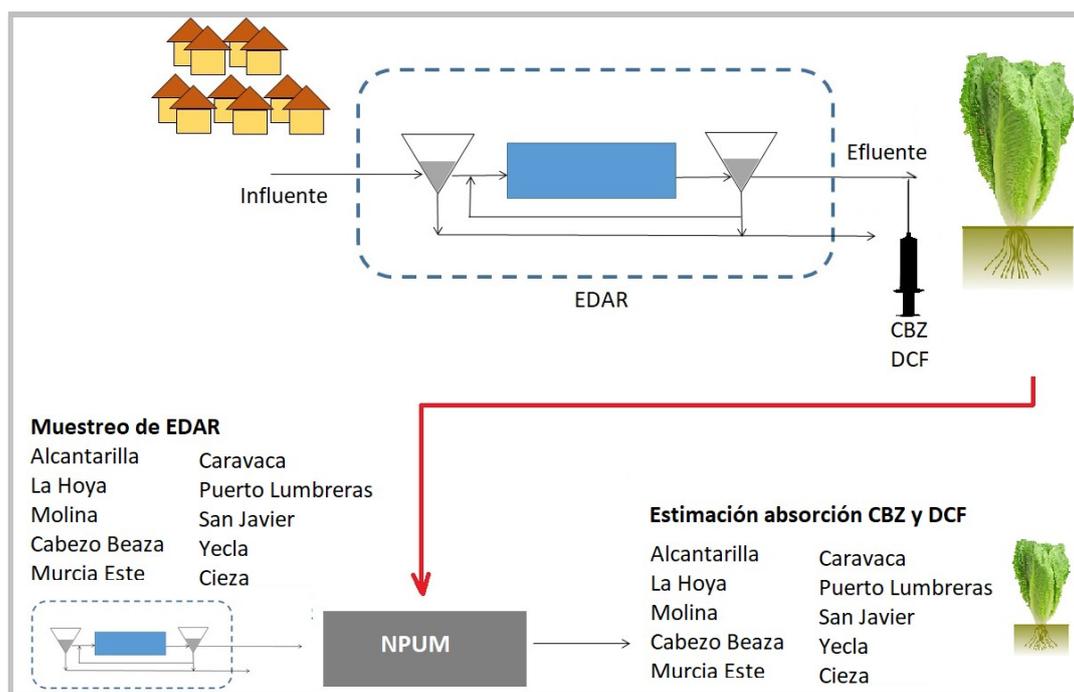


Figura 46. Esquema de diseño de la predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechuga en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia con el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

Como hemos visto en la sección anterior, necesitamos introducir en el modelo los valores de las propiedades físicoquímicas de los CE que queremos predecir la concentración en los tejidos de las lechugas. Además, hay que introducir unos parámetros

propios del cultivo que estamos estudiando (en este caso lechugas). Este modelo es diferente al anterior donde también predecía las concentraciones de los CEs en los diferentes tejidos de las lechugas, pero no necesitábamos definir en el modelo las propiedades físicoquímicas de los CEs ni tampoco los parámetros del cultivo. La ventaja de este modelo respecto al anterior es que podemos controlar en todo momento cualquier cambio o modificación en las condiciones de los cultivos tales como la transpiración, el índice de crecimiento de hojas y raíces, el tiempo hasta la recolección y qué está sometido al riego con CEs, así como también el pH del suelo o sustrato donde está el cultivo en cuestión. Esto permite personalizar en todo momento los experimentos que pueden ser llevados a cabo, porque aunque parece obvio, las condiciones ambientales no serán exactamente iguales aunque se intenten controlar todos los parámetros (por ejemplo la irradiación solar no será la misma en un cultivo que esté situado en Murcia o en Madrid por ejemplo). Todos estos parámetros influyen en la absorción de CEs en los cultivos. Esto que podría suponer una complejidad a la hora de manejar el modelo de predicción en comparación con el anterior, es una gran ventaja ya que nos permite ir jugando con los diferentes parámetros cambiando las diferentes variables del sustrato, cultivo, duración del ciclo,..., de tal forma que podemos estudiar que variables influyen más en la absorción y traslocación de los CEs en la planta y así poder disminuir la concentración de CEs absorbidos por las plantas y por consiguiente minimizar el riesgo humano de incorporar dichos CEs a la cadena alimentaria.

5.7.10. Calibración en la predicción de absorción de KTP y NPX realizados con el modelo de simulación NPUM

Teniendo en cuenta los valores obtenidos en el experimento realizado con las tres variedades de lechugas en las que se regaron con el efluente de la EDAR al que se añadieron CBZ y DCF a las siguientes concentraciones de 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$ y la calibración realizada para estos dos CE's con el modelo de simulación NPUM, se calibró este modelo de predicción con el objetivo de predecir la acumulación de KTP y NPX en los diferentes tejidos de la planta cuando se riegan las lechugas a otras concentraciones de estos CE's en el agua de riego. En la siguiente figura (Figura 47), se puede ver el diseño de la predicción de KTP y NPX con el modelo de simulación NPUM.

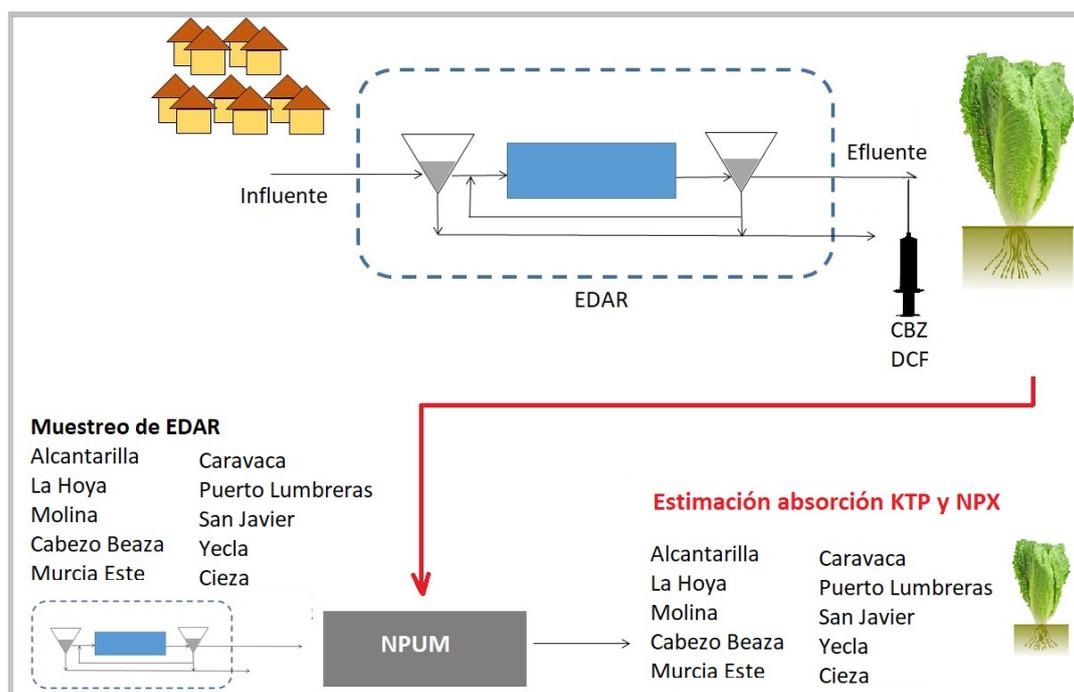


Figura 47. Esquema de diseño de la predicción de acumulación de KTP y NPX en lechuga en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia con el modelo NPUM. Fuente: elaboración propia

Tal y como se explicó en la sección anterior, una vez introducidos los parámetros propios del cultivo que estamos estudiando (en este caso lechugas), se introdujeron en el modelo los valores de las propiedades físicoquímicas de los KTP y NPX que queremos predecir en la concentración en los tejidos de las lechugas en la hipótesis que fueran

regadas con el agua procedente de las 10 EDAR representativas de la Región de Murcia que contenían en el efluente concentraciones de KTP y NPX tal y como se puede ver en la siguiente tabla.

Tabla 17. Tabla de concentraciones medias ($\mu\text{g L}^{-1}$) de los CEs en los efluentes de las EDAR estudiadas

EDAR	KTP ^a	NPX ^a
Alcantarilla (AL)	0,67	0,28
La Hoya - Lorca (LH)	1,39	0,94
Molina de Segura (MN)	< 0,012	< 0,011
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	< 0,012	1,01
Murcia Este (ME)	0,34	0,23
Caravaca de la Cruz (CC)	0,12	< 0,011
Puerto Lumbreras (PL)	< 0,012	3,70
San Javier (SJ)	< 0,012	< 0,011
Yecla (Y)	< 0,012	< 0,011
Cieza (Ci)	< 0,012	< 0,011

^a Fernández-López et al., 2016.

5.7.11. Predicción de absorción de IBP, KTP y NPX realizados con el modelo de simulación NPUM

Tomando como base lo explicado en los dos apartados anteriores, en el que con la calibración realizada para la CBZ y DCF con el modelo de simulación NPUM con las tres variedades de lechugas, en las que se regaron con el efluente de la EDAR al que se añadieron CBZ y DCF a las siguientes concentraciones de 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$, se realizó en esta ocasión una calibración del modelo de simulación NPUM para predecir la concentración de IBP, KTP y NPX a unas concentraciones mayores que las predicciones realizadas con las concentraciones de los efluentes de las 10 EDAR representativas de la Región de Murcia. En esta ocasión se planteó la calibración del modelo de simulación NPUM para predecir las concentraciones de IBP, KTP y NPX en las lechugas a unas concentraciones de 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$ en el agua de riego (Figura 48).

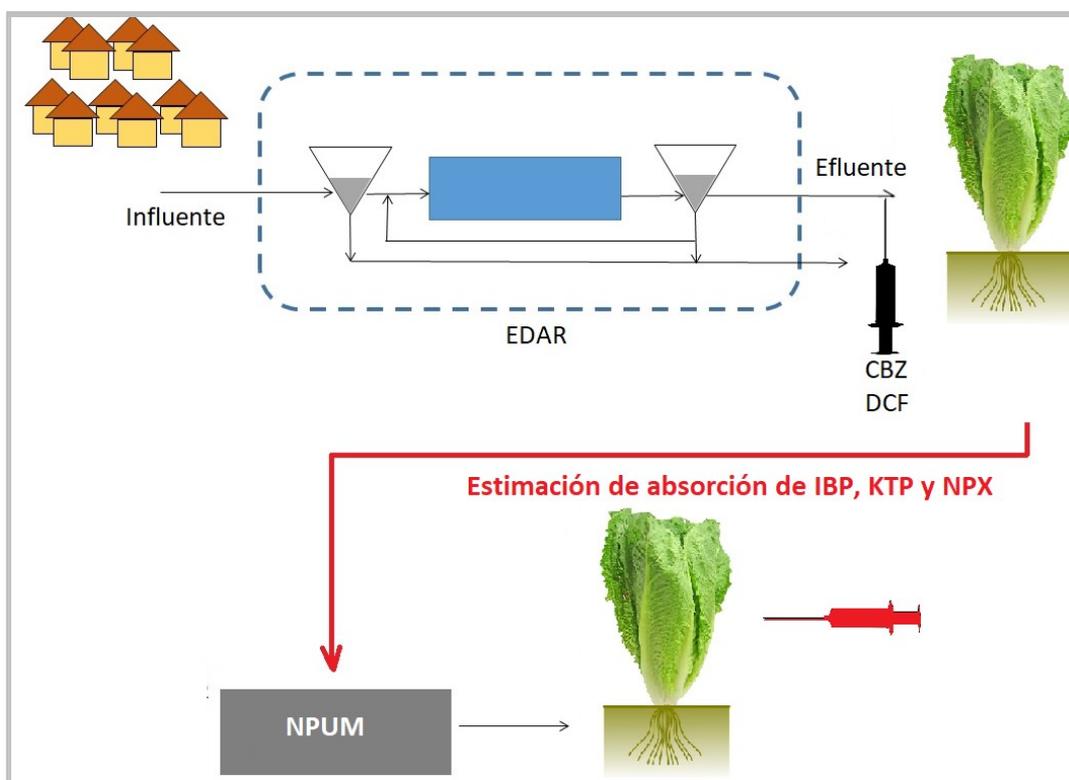


Figura 48. Esquema de diseño de la predicción de acumulación de IBP, KTP y NPX en lechuga a diferentes concentraciones con el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

VI – RESULTADOS Y DISCUSIÓN

VI – RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A lo largo del presente capítulo se realiza una exposición y análisis de los resultados obtenidos en los dos experimentos realizados (primero: riego de cultivos hortícolas con agua procedente de la EDAR de referencia y segundo: riego con agua mezclada con CBZ y DCF en tres variedades de lechuga) y de las simulaciones realizadas para la predicción de absorción de CEs con los modelos de predicción estudiados.

Además, se justificará la validación de los modelos de predicción de absorción de CEs, frente a los obtenidos experimentalmente.

Siguiendo la estructura desarrollada en la metodología, este capítulo presenta dos apartados. En el primero se analizarán los datos de absorción y acumulación de los CEs en los vegetales estudiados. En el segundo apartado se expondrán los resultados que del análisis de los modelos de predicción de absorción de CEs en los cultivos planteados en el desarrollo de esta tesis.

El análisis de los resultados nos permitirá interpretar la influencia de diversos factores tales como: la concentración de los CEs, tipo de CEs, etc., en la absorción en los diferentes tejidos de las plantas.

6.1. RESULTADOS DE LOS EXPERIMENTOS REALIZADOS EN INVERNADERO

6.1.1. Resultado del primer experimento en cultivo hidropónico

En este primer experimento realizado con los cinco cultivos estudiados (lechuga, perejil, col, brócoli y calabacín) regados con el efluente de la EDAR Roldán, Lo Ferro y Balsicas el principal objetivo fue estudiar la absorción y acumulación de los CE seleccionados (CBZ, DCF, IBP, KTP y NPX) en las diferentes partes de la planta y realizar la elección de los cultivos más sensibles en la captación y absorción de CE.

Los cultivos estudiados estuvieron expuestos a diferentes concentraciones de CE (CBZ 10,11 ng L⁻¹; DCF 6,64 ng L⁻¹; IBP 1,80 ng L⁻¹; KTP 18,97 ng L⁻¹ y NPX 11,53 ng L⁻¹) en el agua de riego según los análisis del efluente (Martínez-Alcalá et al., 2017). En la siguiente gráfica (Figura 49) se puede ver la concentración de los CE a la entrada de la EDAR (influyente) y en la salida de la misma (efluente).

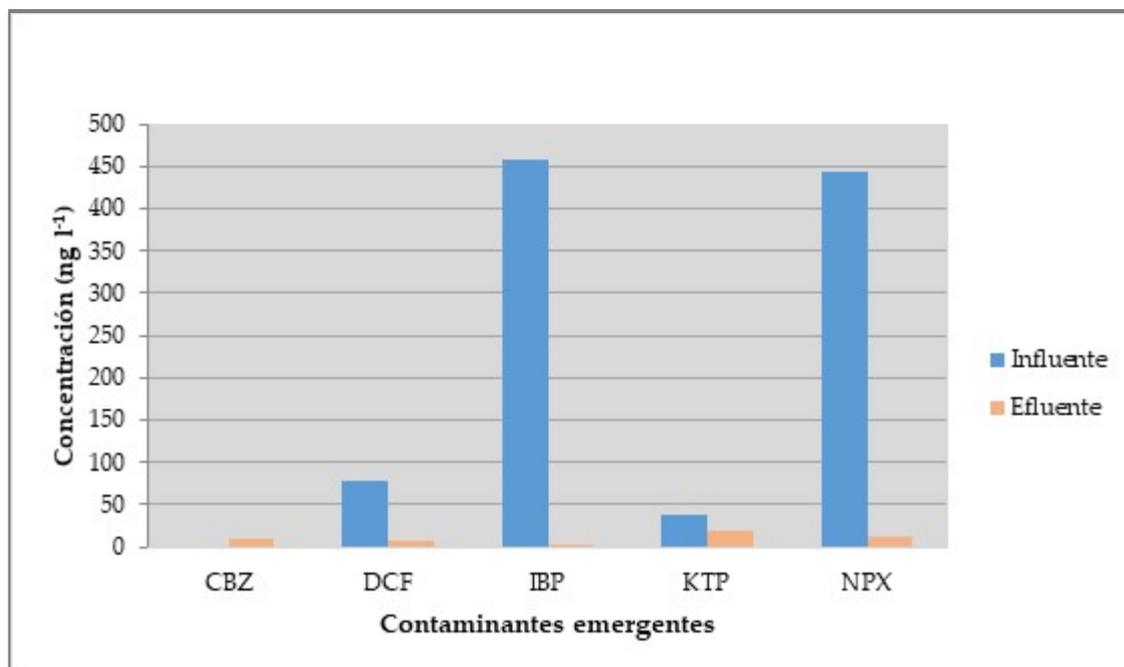


Figura 49. Concentraciones de los CE (ng L⁻¹) en el influente y en el efluente de la EDAR utilizada como riego en los vegetales cultivados dentro del invernadero. Fuente: elaboración propia

Una vez que recolectaron y se analizaron los cultivos seleccionados para estudiar la absorción y acumulación de CE en las diferentes partes de las plantas, tan solo se encontró IBP en las hojas de lechuga Mini Romana variedad Jabera a una concentración $15,40 \pm 0,32 \text{ ng g}^{-1}$. En los demás cultivos que fueron regados con el agua procedente del efluente de la EDAR no se detectó ningún CE.

La concentración de IBP detectada en las hojas de lechuga fue muy baja y partiendo de este valor se calculó el riesgo humano que supondría el consumo de la parte comestible de la lechuga y la incorporación del CE a la cadena alimentaria. Se realizó una evaluación de los riesgos potenciales de las lechugas comestibles regadas con el efluente procedente de la EDAR que contiene IBP.

Se realizó el cálculo siguiendo el método descrito en Hyland et al. (2015), en el cual la ingesta diaria humana de cada CE se estimó multiplicando la concentración calculada para la porción comestible (ng g^{-1}) por el consumo medio de lechuga. Según datos obtenidos de distintas referencias, el consumo medio de lechuga es de $7,0 \text{ g d}^{-1}$ para un individuo de 70 kg (National Center for Environmental Assessment, 2011); $8,3 \text{ g d}^{-1}$ en la población belga de más de 15 años (Temme et al., 2011) y de $9,00 \text{ g d}^{-1}$ para mujeres comprendidas entre 14 y 75 años con un peso corporal de $67,30 \text{ kg}$ (Legind y Trapp, 2009). Los cálculos se realizaron para el consumo más elevado según los datos expuestos, es decir, para mujeres consumidoras con un peso corporal de $67,30 \text{ kg}$.

Tomando en consideración las ingestas diarias aceptables para IBP (Prosser y Sibley, 2015), que indican la cantidad máxima de IBP que una persona puede ingerir por día, los resultados mostraron que la cantidad estimada de IBP ingerida por día está por debajo de los límites que pudiera poner en riesgo a la salud humana. El consumo diario estimado de IBP estaba por debajo de los $15,40 \text{ ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ en hojas, no llegando al límite marcado de los $11.400,00 \text{ ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ del consumo diario aceptable ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$) (Figura 50).

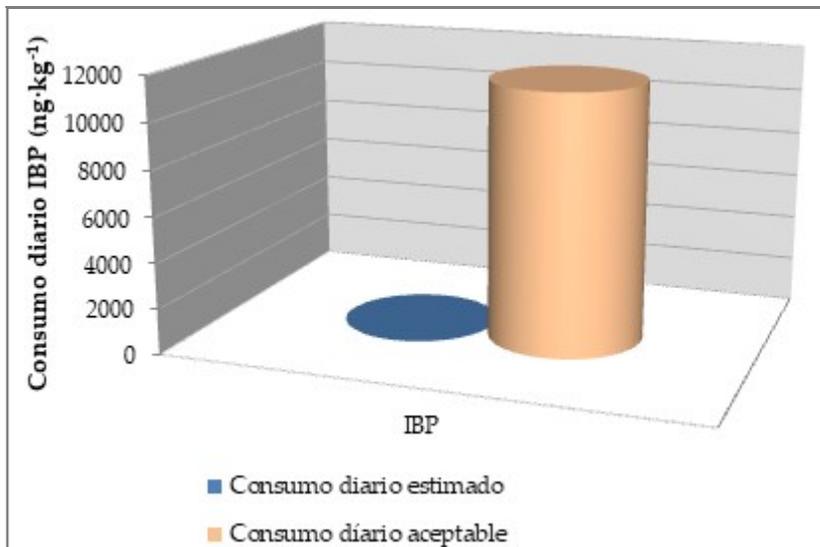


Figura 50. Gráfica del consumo diario estimado en hojas de lechuga de IBP y el consumo diario aceptable. Fuente: elaboración propia

Por tanto, tal y como se observa en los cálculos realizados no hay ningún riesgo humano al consumir lechugas con esta concentración de IBP en la parte comestible de las lechugas debido a su incorporación a la cadena alimentaria.

6.1.2. Resultado del segundo experimento en cultivo hidropónico

En este segundo experimento a la vista de los resultados obtenidos en el primer experimento en los cultivos, el estudio se centró en el cultivo de las lechugas donde se estudiaron tres variedades de lechuga (Lechuga Iceberg var. Gitana, Lechuga Mini Romana var. Jabera y Lechuga Hoja de Roble var. Kiprien) y así poder observar el comportamiento y la respuesta del cultivo de lechuga a la exposición de CBZ y DCF para que pudiéramos comparar y valorar el comportamiento, la absorción y la translocación de estos desde la raíz hasta el resto de la planta de dos CEs con diferentes propiedades fisicoquímicas. Se utilizó el efluente de la EDAR Roldán, Lo Ferro y Balsicas como agua de riego en este experimento y se realizó una nueva analítica del efluente de la EDAR y los resultados en el momento del estudio no revelaron la presencia de CBZ y DCF ya que sus concentraciones estaban por debajo de los límites de detección (Anexo I, Tabla S3). Por este motivo, para realizar este experimento, ya que no hubo detección de CEs en el efluente, se diseñó el experimento con dopaje o aporte de directo de una mezcla de CBZ y DCF en el agua de riego.

6.1.2.1. Presencia de CBZ y DCF en los tejidos vegetales de las lechugas

Los resultados mostraron que los CEs estudiados tienen capacidad de acumularse en los tejidos vegetales de las lechugas. En las siguientes gráficas (Figuras 51 a 52) se pueden observar los resultados de concentración de CBZ en las hojas y raíces de las tres variedades de lechuga. Las concentraciones detectadas en los tejidos vegetales (hojas y raíces) respondieron a las diferentes concentraciones a las que estuvieron expuestas las lechugas en el agua de riego utilizada con concentraciones de CBZ mezclados a 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$. En la Tabla S7 de los anexos, se puede apreciar la calidad de los resultados obtenidos según confirman los coeficientes de regresión lineal entre la dosis aplicada de CBZ y la concentración encontrada en el tejido vegetal de cada variedad de lechuga.

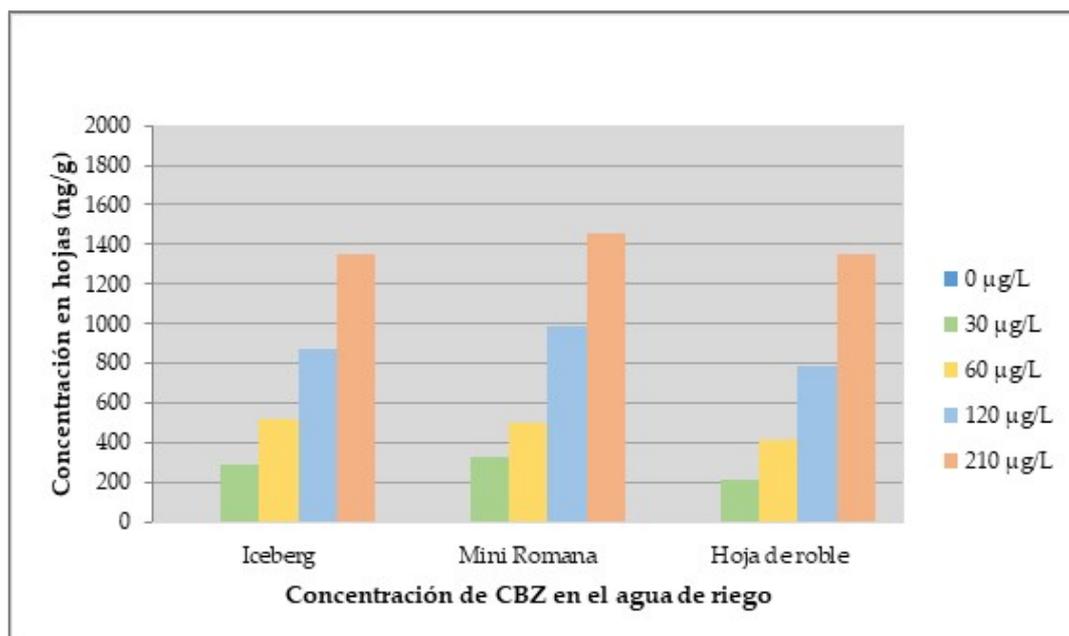


Figura 51. Concentraciones de CBZ (ng g^{-1}) en las hojas de las tres variedades de lechugas regadas con agua mezclada con CBZ a diferentes concentraciones. Fuente: elaboración propia

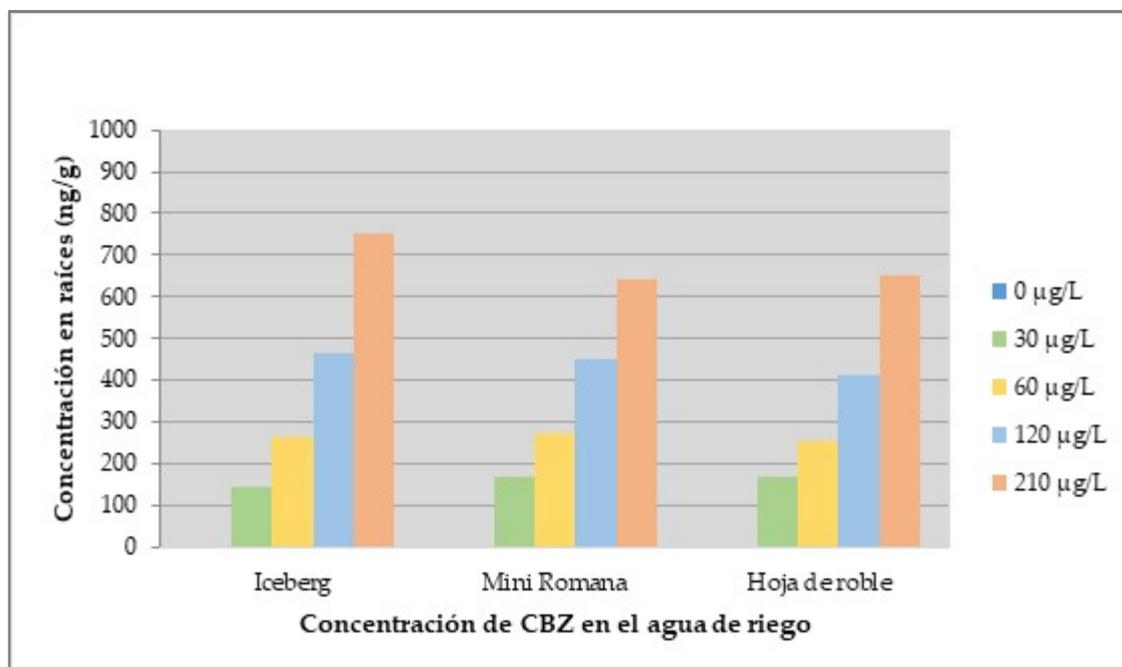


Figura 52. Concentraciones de CBZ (ng g^{-1}) en las raíces de las tres variedades de lechugas regadas con agua mezclada con CBZ a diferentes concentraciones. Fuente: elaboración propia

Tal y como se puede observar en las gráficas anteriores y en la Tabla S8 de los anexos, se encontró CBZ en las tres variedades de lechuga, en concentraciones más altas en las hojas que en las raíces (Hojas: $1350,37 \pm 33,20 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Iceberg, $1456,60 \pm 63,60 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Mini Romana y $1355,30 \pm 41,94 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Hoja de Roble; raíces: $750,67 \pm 24,26 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Iceberg, $640,23 \pm 18,55 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Mini Romana y $650,50 \pm 21,91 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Hoja de Roble, a una concentración de CBZ de $210 \mu\text{g L}^{-1}$ en agua de riego) (Figuras 51 a 52). Si nos centramos en las hojas de las tres variedades de lechuga, fueron las hojas de la variedad Mini Romana donde se encontraron las concentraciones más altas de CBZ, mientras que en las otras dos variedades de lechuga (Iceberg y Hoja de Roble) se encontraron con concentraciones ligeramente inferiores de CBZ.

Con respecto a las raíces, dentro de las tres variedades, fueron las raíces de la lechuga Iceberg donde se encontraron concentraciones ligeramente más altas de la CBZ que en las otras dos variedades de lechuga. Este comportamiento característico de la CBZ, en el que tiende a acumularse en mayor concentración en las hojas que en las raíces, se debe a las propiedades fisicoquímicas de la misma, debido a que posee una carga neutra y

una hidrofobicidad intermedia. En este experimento, la concentración media de CBZ ($\log K_{ow} = 2,3$, $pK_a = 13,9$) detectada en las hojas fue un 46% mayor que en las raíces.

Estos resultados están respaldados por numerosas publicaciones, como en experimentos realizados en plantas de soja que se regaron con agua mezclada con $10 \mu\text{g L}^{-1}$ de CBZ y posteriormente se encontró principalmente acumulado en las hojas ($216 \pm 75 \text{ ng g}^{-1} \text{ dw}$) (Wu et al., 2010). En otra investigación con pepinos regados con aguas residuales enriquecidas con 1 g L^{-1} de CBZ observó entre 19 y $39 \mu\text{g g}^{-1} \text{ dw}$ de CBZ en las hojas y de 2 a $4,5 \mu\text{g g}^{-1} \text{ dw}$ en las raíces (Shenker et al., 2011). Los compuestos neutros pueden atravesar las membranas celulares con más facilidad que los compuestos iónicos (Malchi et al., 2014).

Al contrario que con la CBZ, la concentración de DCF detectada en las tres variedades de lechuga, fue mayor en las raíces que en las hojas (Hojas: $75,73 \pm 3,80 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Iceberg, $82,10 \pm 4,23 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Mini Romana y $78,07 \pm 2,81 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Hoja de Roble; raíces: $496,40 \pm 26,40 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Iceberg, $501,40 \pm 18,11 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Mini Romana y $490,47 \pm 27,42 \text{ ng g}^{-1}$ en variedad Hoja de Roble, a una concentración de DCF de $210 \mu\text{g L}^{-1}$ en agua de riego) (Figuras 53 a 54), lo que sugiere que el DCF fue absorbido por las raíces y luego transportado a las hojas en un proceso de translocación relativamente lento. Dentro de las tres variedades de lechuga, la variedad Mini Romana acumuló la mayor cantidad de DCF tanto en raíces como en hojas. Este comportamiento es propio de los compuestos con un $\log K_{ow} > 4$, que son fácilmente absorbidos por las raíces (Zhang et al., 2012).

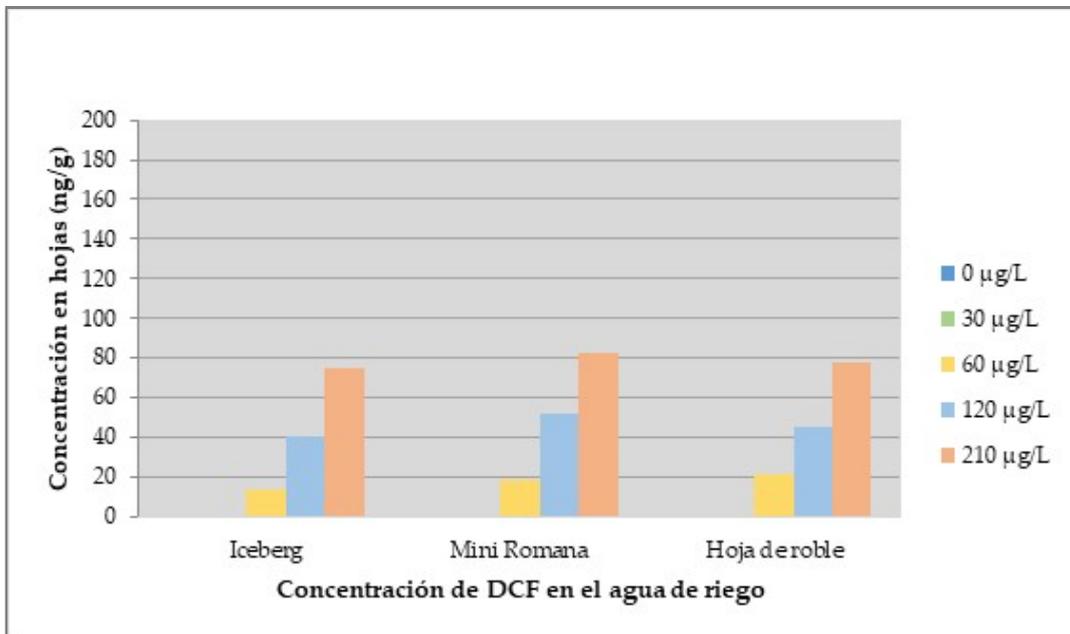


Figura 53. Concentraciones de DCF (ng g^{-1}) en las hojas de las tres variedades de lechugas regadas con agua mezclada con DCF a diferentes concentraciones. Fuente: elaboración propia

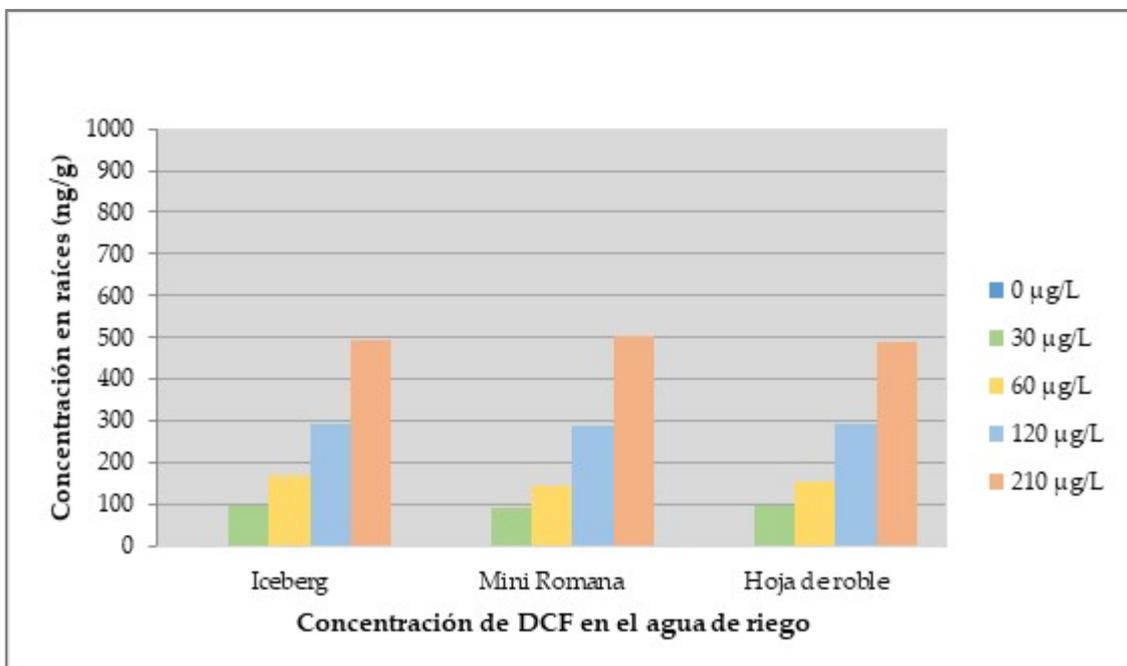


Figura 54. Concentraciones de DCF (ng g^{-1}) en las raíces de las tres variedades de lechugas regadas con agua mezclada con DCF a diferentes concentraciones. Fuente: elaboración propia

Esta observación ha sido corroborada por otros estudios que indican que los compuestos hidrofóbicos como el DCF, están tan fuertemente ligados a la superficie de las raíces que dificultan su translocación y movimiento a la parte aérea de la planta (Schnoor et al., 1995). Varios autores han observado una fuerte correlación entre la hidrofobicidad de un producto químico ($\log K_{ow}$) y su absorción por las raíces, transporte hacia la parte aérea de la planta (tallos y hojas) y su posterior acumulación en la planta (Briggs et al., 1982; Dettenmaier et al., 2009; Trapp et al., 1994; Trapp, 1995).

La evapotranspiración de un producto químico y la retención del suelo son factores que influyen en la absorción de este por las plantas. Hay estudios previos donde se relaciona la evapotranspiración con la acumulación de productos químicos neutros e iónicos en los tejidos vegetales (Dodgen et al., 2015). En este experimento, la concentración media de DCF ($\log K_{ow} = 4,5$, $pK_a = 4,4$) detectada en las raíces fue un 89% mayor que en las hojas.

Los productos químicos están sujetos al transporte y la biodegradación cuando entran en el suelo. Además, los productos químicos altamente hidrófobos tales como DCF con fuerte adsorción del suelo pueden tener una biodisponibilidad relativamente baja para la absorción de la planta, mientras que los productos químicos con hidrofobicidad intermedia tales como CBZ pueden tener una biodisponibilidad relativamente alta debido a sus características de adsorción de suelo débil (Tanoue et al., 2012). En la Tabla S10 de los anexos se puede observar la cantidad de CE retenido en el sustrato de fibra de coco,

En conclusión, los compuestos hidrofóbicos intermedios (CBZ) son más fácilmente absorbidos que los compuestos altamente hidrófobos (DCF) (Tanoue et al., 2012). Estos resultados destacan la importancia de las características fisicoquímicas de cada CE y su tendencia de acumulación en cada parte de la planta. Esto es destacable a la hora de seleccionar que cultivo a implantar y regar con el agua procedente de las EDAR dependiendo de los resultados de las analíticas dependiendo la concentración mayor o menor de un tipo de CE u otro. En el caso a implantar cultivos para aprovechamiento en el consumo humano de la parte aérea de la planta, tendremos que tener en cuenta que el agua de riego no tenga una concentración muy alta de CEs con hidrofobicidad intermedia y $\log K_{ow} < 4$, ya que estos tenderán a acumularse a la parte aérea de la planta y será preferible que en la analítica se detecten CEs hidrofóbicos y con $\log K_{ow} > 4$ con tendencia a acumularse en las raíces. Por el contrario, en cultivos que se aprovechen para el consumo humano la parte de la raíz de la planta, será preferible que el agua de riego

tenga una concentración mayor de CEs con hidrofobicidad intermedia y $\log K_{ow} < 4$ que de CEs hidrofóbicos y con $\log K_{ow} > 4$ con tendencia a acumularse en las raíces por el mismo motivo explicado anteriormente. Por esta razón, es muy importante tener en cuenta que tipo y qué concentración de CEs tiene el agua de riego y en que cultivos se va a emplear ese agua.

6.1.2.2. Cálculo del Factor de Bioconcentración

El Factor de Bioconcentración es la relación de concentración entre el organismo y el medio circundante y nos indica la capacidad que tiene el producto químico de acumularse en el tejido vegetal (hojas y raíces) después de su absorción desde el medio circundante. En este estudio, se ha calculado el Factor de Bioconcentración de la CBZ y DCF con la siguiente fórmula en los respectivos tejidos vegetales.

$$BCF = \frac{\text{Concentración en el tejido vegetal } (\mu\text{g/kg dw})}{\text{Concentración del CE en el agua de riego } (\mu\text{g/l})}$$

Ec. (23)

Se ha calculado un BCF para cada concentración de CE mezclado con el agua (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g/L}$) y poder observar la respuesta en cada tramo estudiado. Valores más altos de BCF indican que el CE tiene mayor tendencia a acumularse en una parte del tejido vegetal que en otro, por el contrario, unos valores bajos de BCF indican una menor tendencia del CE a acumularse en esa parte del tejido vegetal. Para corroborar esta tendencia, se calcularon los BCFs en hojas y raíces de las lechugas con los valores obtenidos del segundo experimento realizado y se compararon los resultados obtenidos en la CBZ y DCF en las hojas y raíces de las tres variedades de lechuga estudiadas. En la Tabla S9 de los anexos se pueden ver los resultados de los cálculos realizados. El valor más alto de BCF resultado de los cálculos realizados fue 1 y el valor más bajo fue cercano a 0, según este planteamiento en las siguientes gráficas (Figuras 55 y 56) tenemos los BCFs de la CBZ y DCF en las hojas y raíces en las tres variedades de lechuga. Los resultados de los cálculos de BCF en las concentraciones más bajas de CE aportadas (30 $\mu\text{g/L}$) fueron más altas, para ir disminuyendo según aumentaban las concentraciones de CE mezclados en el agua de riego.

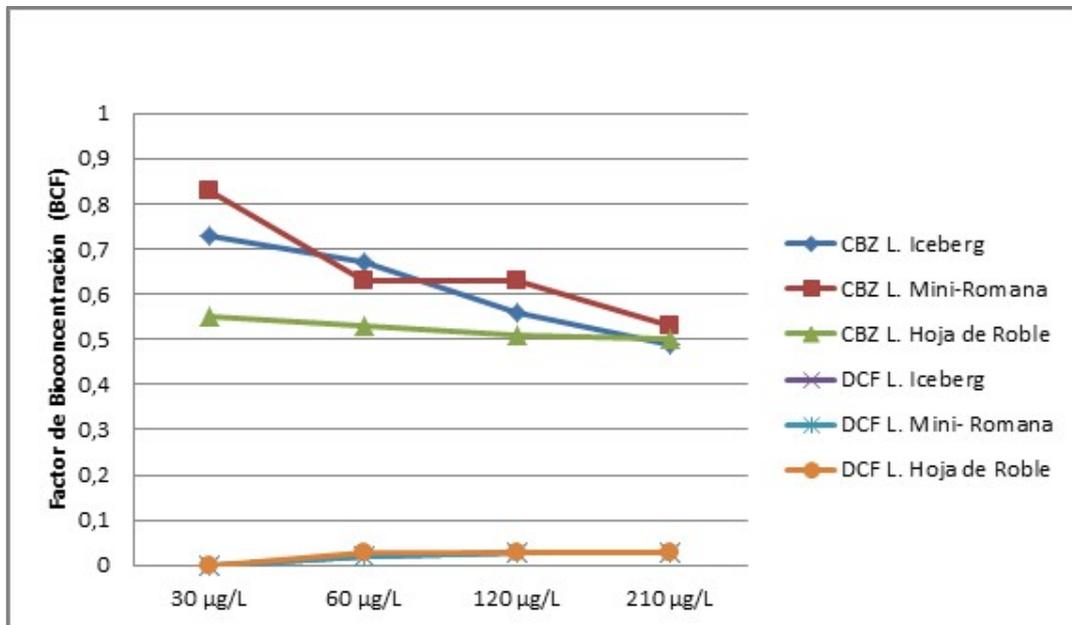


Figura 55. Factor de bioconcentración de CBZ y DCF en hojas. Fuente: elaboración propia

Como se puede observar en la gráficas (Figuras 55 y 56) los valores de BCFs más altos obtenidos correspondieron a la CBZ, los cuales fueron más altos en las hojas que en las raíces y los valores de BCFs más bajos calculados fueron en las hojas del DCF con unos valores cercanos a cero.

Los valores más altos de BCF de la CBZ se encontraron en las hojas de la lechuga variedad Mini-Romana con unos valores comprendidos entre 0,83 y 0,53 (a una concentración de CBZ de 30 y 210 µg/L respectivamente) y los más bajos se encontraron en la variedad Hoja de Roble con unos valores comprendidos entre 0,55 y 0,50 (a una concentración de CBZ de 30 y 210 µg/L respectivamente). Con respecto a los valores de BCF de la CBZ en las raíces, los valores más altos se mostraron en las variedades Mini-Romana y Hoja de Roble con unos valores en unos intervalos entre 0,43 y 0,23 (a una concentración de CBZ de 30 y 210 µg/L respectivamente) y la variedad Hoja de Roble mostraron los valores más bajos de BCFs con unos valores comprendidos entre 0,37 y 0,27 (a una concentración de CBZ de 30 y 210 µg/L respectivamente).

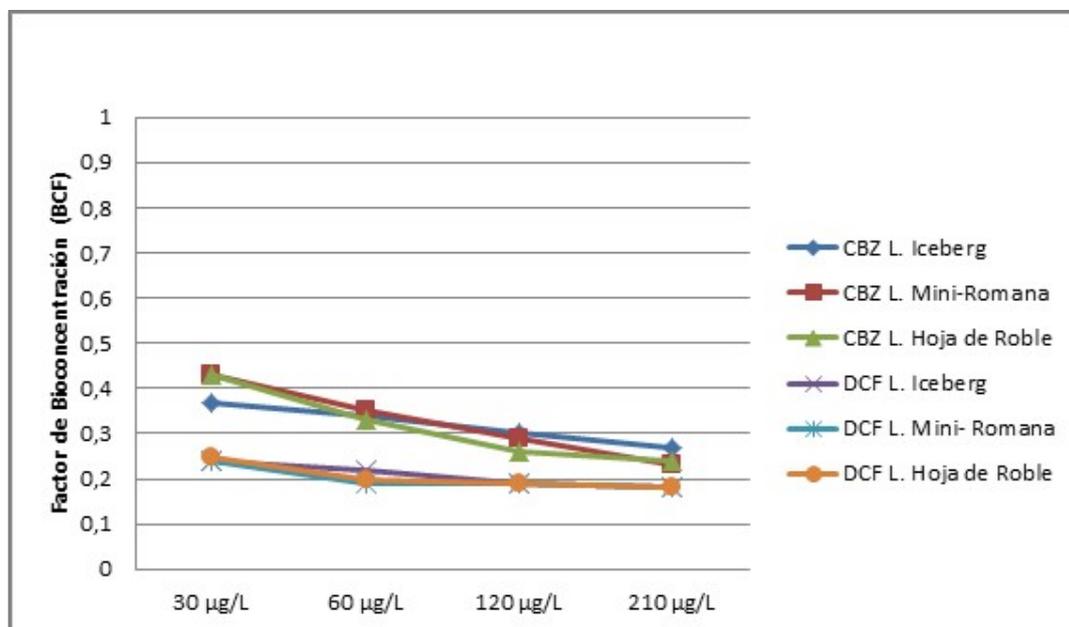


Figura 56. Factor de bioconcentración de CBZ y DCF en raíces. Fuente: elaboración propia

En el DCF al contrario que en la CBZ, los valores de BCF se mostraron más altos en las raíces que en las hojas. Los valores de BCF en las hojas fueron similares en las tres variedades de lechuga con unos valores cercanos a cero. En las raíces, los valores de DCF fueron también similares en las tres variedades de lechuga con unos valores comprendidos entre 0,25 y 0,18.

Los productos químicos (Kumar y Gupta, 2016) se absorben a diferentes velocidades en diferentes partes de las plantas en función de sus propiedades fisicoquímicas ($\log K_{ow}$, peso molecular, etc.).

Los resultados obtenidos, están respaldados por otros estudios como los publicados por Briggs et al. (1982) y Topp et al. (1986), donde sugieren que la mayor capacidad de captación de DCF en las raíces (en comparación con las hojas) puede atribuirse a su alta hidrofobicidad y baja solubilidad en agua ($2,37 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$ a 25°C). Además, dentro de las propiedades físico - químicas, los productos químicos con un $\log K_{ow} > 4$ como el DCF, tienen un alto potencial de retención en las raíces de las plantas.

La CBZ, al tener unas propiedades fisicoquímicas diferentes al DCF con un $\log K_{ow}=2,3$ y una hidrofocibidad intermedia, explica el comportamiento y la tendencia del CE de acumularse en mayor concentración en las hojas que en las raíces de la planta.

Estos valores calculados de BCF, mostraron de una manera clara la tendencia de la CBZ a acumularse en las hojas de las tres variedades de lechuga en mayor proporción que en las raíces. Por el contrario, el comportamiento del DCF es diferente a la CBZ y tiende a ser retenido en las raíces con lo que la concentración de este producto químico en las raíces es mayor que en las hojas.

6.1.2.3. Relación de la concentración Hoja/Raíz ($C_{\text{hoja}}/C_{\text{raíz}}$)

La relación de concentración hoja / raíz ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) se calculó para evaluar el potencial de translocación de los dos CEs estudiados a las raíces y hojas de las lechugas. Al igual que el BCF calculado en el apartado anterior, la $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ es otra forma de calcular la tendencia de los CEs a acumularse en la parte aérea o en las raíces de las plantas estudiadas. Para calcular la relación de concentración hoja / raíz ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) se empleó la siguiente fórmula:

$$C_{\text{hoja}}/C_{\text{raíz}} = \frac{\text{Concentración de CE en las hojas}}{\text{Concentración de CE en las raíces}} \quad \text{Ec. (24)}$$

Donde se calcularon cada valor de $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ según los valores obtenidos en las hojas y raíces de las tres variedades de lechuga en cada concentración de CE mezclada en el agua de riego (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g/L}$). Unos valores altos (mayor de 1) de esta relación de concentración muestran que el comportamiento los CEs tienden a acumularse en las los tallos y hojas de los cultivos estudiados. Unos valores bajos de la relación de concentración indican una mayor tendencia de los CEs estudiados a ser retenidos y acumulados en las raíces.

Como se puede observar en la siguiente gráfica (Figura 57), en la CBZ la relación $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ fue mayor que 1 en las tres variedades de lechuga en las cuatro concentraciones de CBZ aportadas en el agua de riego (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g/L}$). Esta relación mayor que uno, nos indica una buena translocación de la CBZ de la raíz a la hoja.

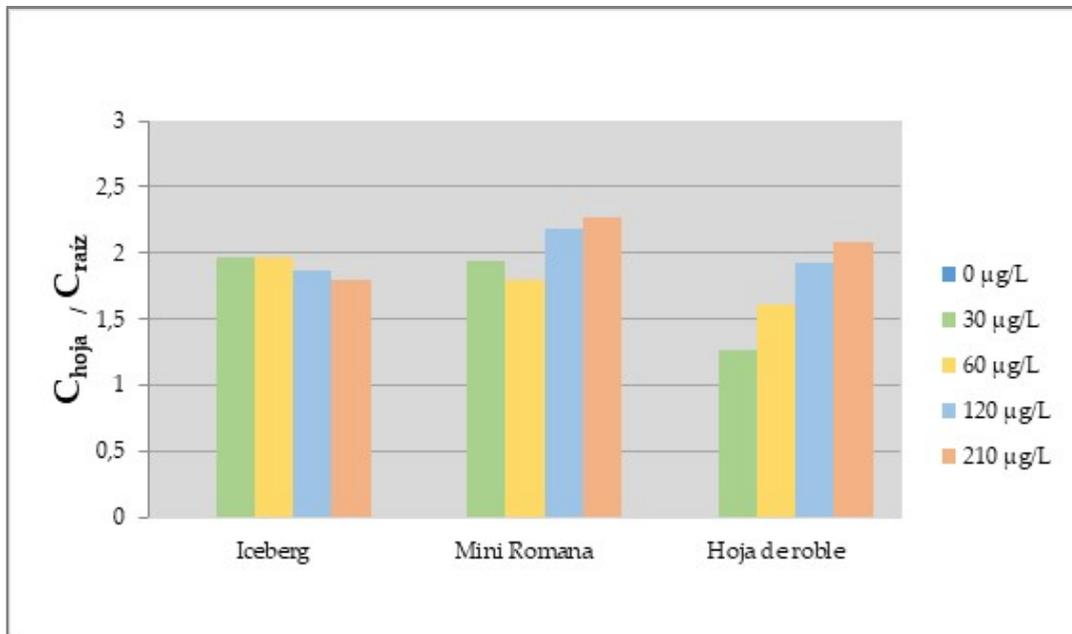


Figura 57. Relaciones de concentración de hoja / raíz en CBZ ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raiz}}$). Fuente: elaboración propia

Por el contrario, en el caso del DCF (Figura 58), las relaciones $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raiz}}$ mostraron valores cercanos a cero.

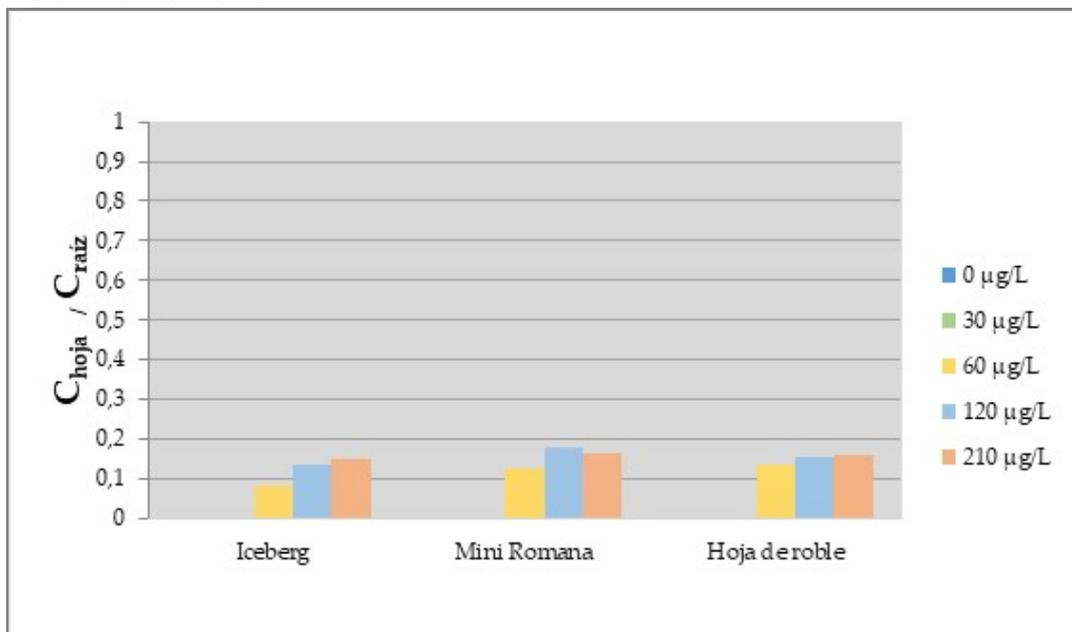


Figura 58. Relaciones de concentración de hoja / raíz en DCF ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raiz}}$). Fuente: elaboración propia

El comportamiento de la translocación limitada del DCF es explicado debido a su lipofilia, lo que significa que la translocación de las raíces a las hojas se considera un proceso pasivo que depende de las propiedades fisicoquímicas del producto químico (Simonich y Hites, 1995).

Estos resultados obtenidos están respaldados por otros experimentos realizados anteriormente, como los publicados por Briggs et al. (1982) que demostraron que la eficiencia de la translocación de un producto químico de la raíz a la hoja es independiente de su concentración en la solución externa. En las gráficas anteriores (Figuras 57 y 58), podemos apreciar estas afirmaciones, donde todos los valores $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ no dependen de la concentración de la CBZ y DCF en el agua de riego en las tres variedades de lechugas estudiadas. Dentro de las tres variedades de lechuga, se mostraron valores ligeramente más altos de $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ de CBZ y DCF en la variedad Mini Romana que en las otras dos variedades de lechugas.

6.1.2.4. *Cálculo del riesgo de consumo de lechugas regadas con agua procedente de EDAR para la salud humana*

Tal y como se realizó para el primer experimento, se calculó si la acumulación de CBZ y DCF en las partes comestibles de las lechugas constituye un riesgo potencial para la salud humana debido a su incorporación a la cadena alimentaria.

Para realizar esta evaluación, se tuvo en cuenta el peor escenario de exposición que se obtuvo en las concentraciones más altas de CBZ y DCF observadas en las hojas de lechuga correspondientes a la respuesta con las dosis de CE's más altas mezcladas en el agua de riego (210 µg/L).

Se realizó el cálculo siguiendo el método descrito en Hyland et al. (2015), en el cual la ingesta diaria humana de cada medicamento para cada variedad de lechuga se estimó multiplicando la concentración calculada para la porción comestible (ng g⁻¹) por el consumo medio de lechuga. Según datos obtenidos de distintas referencias, el consumo medio de lechuga es de 7,0 g d⁻¹ para un individuo de 70 kg (National Center for Environmental Assessment, 2011); 8,3 g d⁻¹ en la población belga de más de 15 años (Temme et al., 2011) y de 9,00 g d⁻¹ para mujeres comprendidas entre 14 y 75 años con un peso corporal de 67,30 kg (Legind y Trapp, 2009). Los cálculos se realizaron para el consumo más elevado según los datos expuestos, es decir, para mujeres consumidoras con un peso corporal de 67,30 kg.

Tomando en consideración las ingestas diarias aceptables para CBZ y DCF (Bruce et al., 2010), que indican la cantidad máxima de CE que una persona puede ingerir por día, y los resultados mostraron que las cantidades estimadas de CE ingeridas por día en los dos CE's estuvieron por debajo de los límites que pudiera poner en riesgo a la salud humana. En el caso de la CBZ el consumo diario estimado estaba por debajo de los 200,00 ng·kg⁻¹, no llegando al límite marcado de los 340,00 ng·kg⁻¹ del consumo diario aceptable (ng·kg⁻¹·d⁻¹). En el DCF, la cantidad diaria estimada ingerida máxima calculada fue de 11,00 ng·kg⁻¹, estando muy alejado del límite marcado de los 67.000,00 ng·kg⁻¹ del consumo diario aceptable (ng·kg⁻¹·d⁻¹) (Tabla 18).

Tabla 18. Tabla de la ingestión estimada de CEs en el consumo de lechugas regadas con agua mezclada con CEs a diferentes concentraciones

CE		Concentración en hojas (ng·g ⁻¹)	Cantidad diaria de CE consumida en lechuga (ng)	Consumo diario estimado de CE (ng·kg ⁻¹ , mujeres, peso 67,30kg)	Consumo diario aceptable (ng·kg ⁻¹ ·d ⁻¹) ^a
Carbamazepina	IL	1.350,21	12.151,89	180,56	340,00
	MRL	1.456,75	13.110,75	194,81	340,00
	OL	1.355,40	12.198,60	181,25	340,00
Diclofenaco	IL	75,45	679,05	10,08	67.000,00
	MRL	82,28	740,52	11,00	67.000,00
	OLL	78,54	706,86	10,50	67.000,00

IL= Lechuga Iceberg; MRL= Lechuga Mini-Romana; OLL= Lechuga Hoja de Roble

^aBruce et al., 2010

Los resultados obtenidos en los consumos diarios estimados de los dos CEs son muy similares en las tres variedades de lechuga, siendo ligeramente más altos en la lechuga Mini-Romana. Tal y como se ha explicado anteriormente y como se puede observar en la tabla anterior, los consumos diarios estimados de los dos CEs son muy bajos y no representan ningún riesgo para la salud humana. Los cálculos obtenidos confirman que el impacto que supone el aprovechamiento del agua regenerada procedente de las EDAR a las concentraciones estudiadas en las lechugas no supone ningún riesgo para la salud y se puede asegurar el uso correcto de las aguas residuales para satisfacer la creciente demanda que su uso tiene en la agricultura.

6.2 RESULTADOS DE LOS MODELOS DE PREDICCIÓN CALIBRADOS.

6.2.1. Comparativa entre los resultados del segundo experimento y la predicción de absorción de CBZ y DCF realizada con los dos modelos de simulación SEI y NPUM

En este apartado se realizó una comparativa de los resultados obtenidos en el segundo experimento en invernadero en el que se añadieron diferentes concentraciones de CBZ y DCF en al agua de riego de las lechugas (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$) con los resultados obtenidos de las predicciones de los dos modelos de simulación SEI y NPUM y así poder estudiar la tendencia de la predicción de estos dos modelos de simulación a unas concentraciones mayores que las analizadas en las simulaciones anteriores a unas concentraciones más bajas de CBZ y DCF detectadas en el efluente de las 10 EDAR representativas de la Región de Murcia (Figura 59).

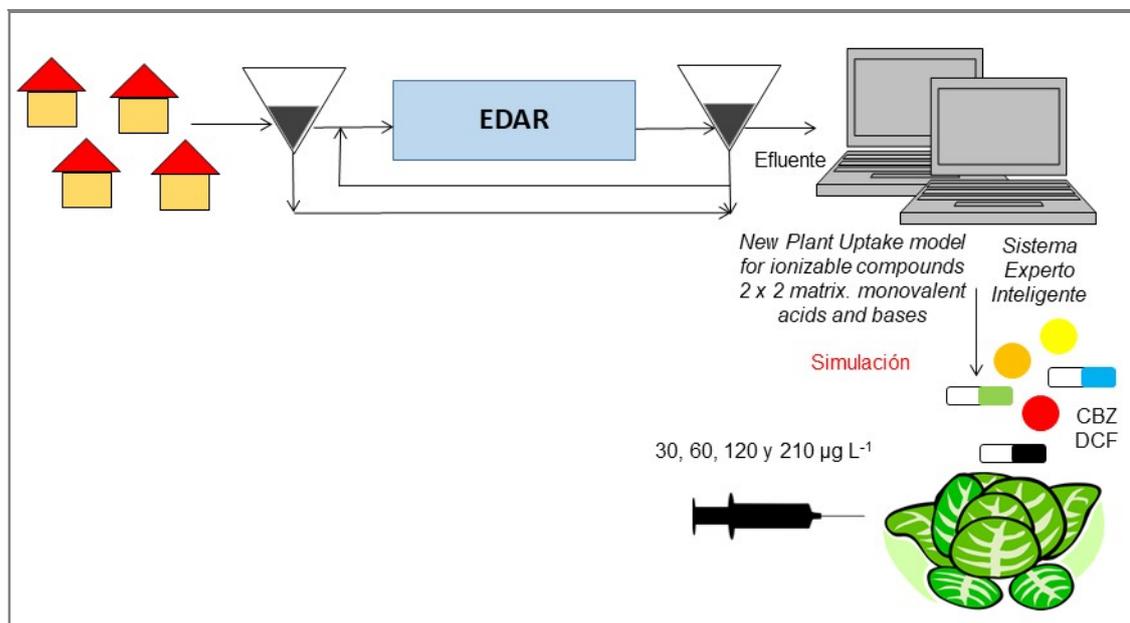


Figura 59. Comparativa de predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechugas entre los dos modelos de simulación SEI y NPUM a diferentes concentraciones. Fuente: elaboración propia

Si estudiamos la predicción de la absorción de la CBZ en las hojas y raíces de las tres variedades de lechuga en los dos modelos de simulación la tendencia es la misma tal y como se puede ver en las siguientes figuras (Figuras 60 a 65). En la predicción de absorción de CBZ en las hojas de las tres variedades de lechuga se puede apreciar una tendencia de predicción más alta en el caso del modelo de simulación SEI a concentraciones más bajas (30 y 60 $\mu\text{g L}^{-1}$) y una tendencia de predicción más alta en el caso del modelo de simulación NPUM a concentraciones más altas (120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$).

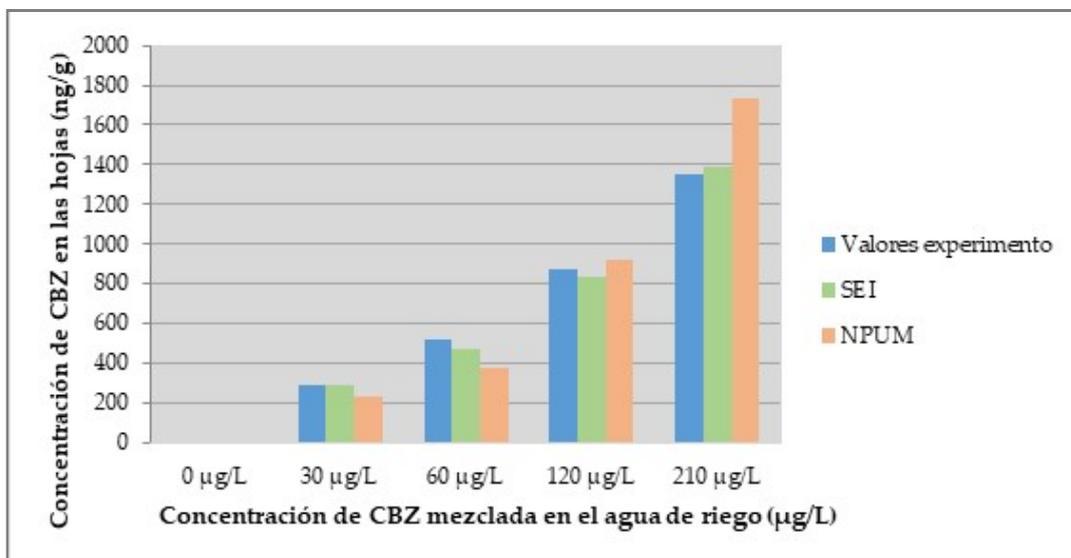


Figura 60. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las hojas de la lechuga Iceberg var. Gitana, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

Esta tendencia de predicción mostrada en las hojas con los dos modelos de simulación con respecto a la CBZ también se repite en las raíces de las tres variedades de lechuga.

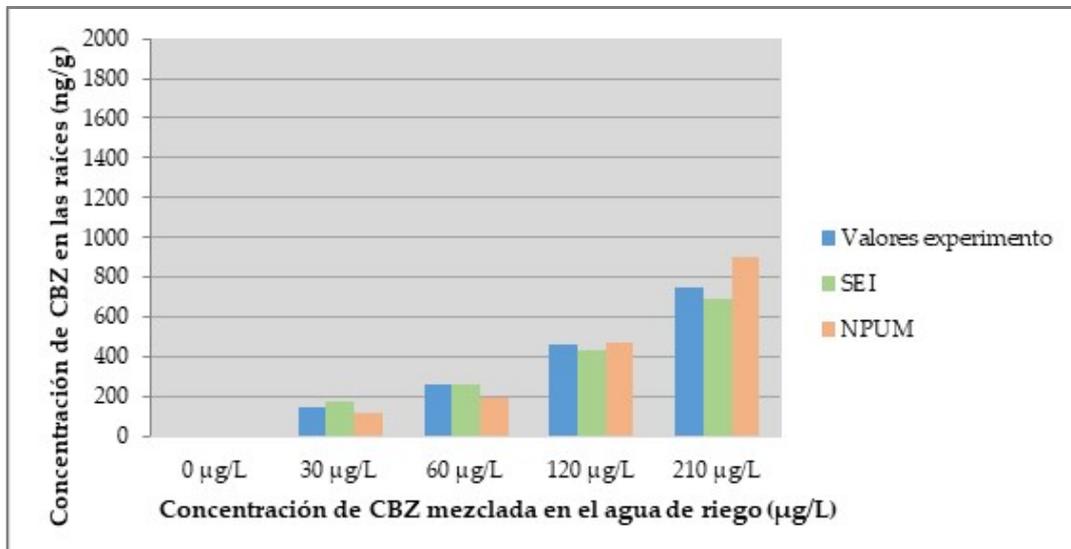


Figura 61. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las raíces de la lechuga Iceberg var. Gitana, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

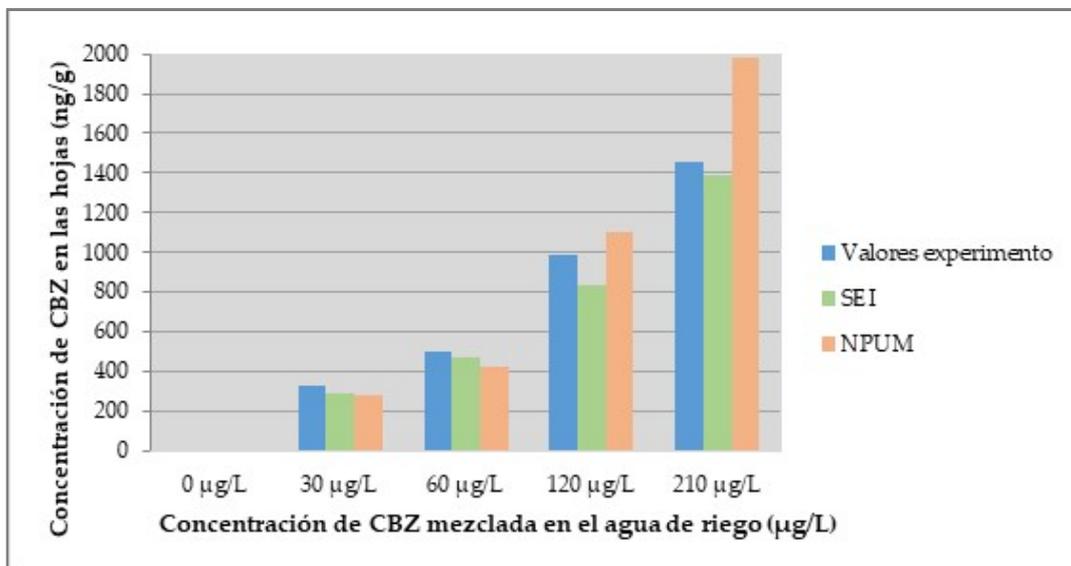


Figura 62. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las hojas de la lechuga Mini Romana var. Jabera, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

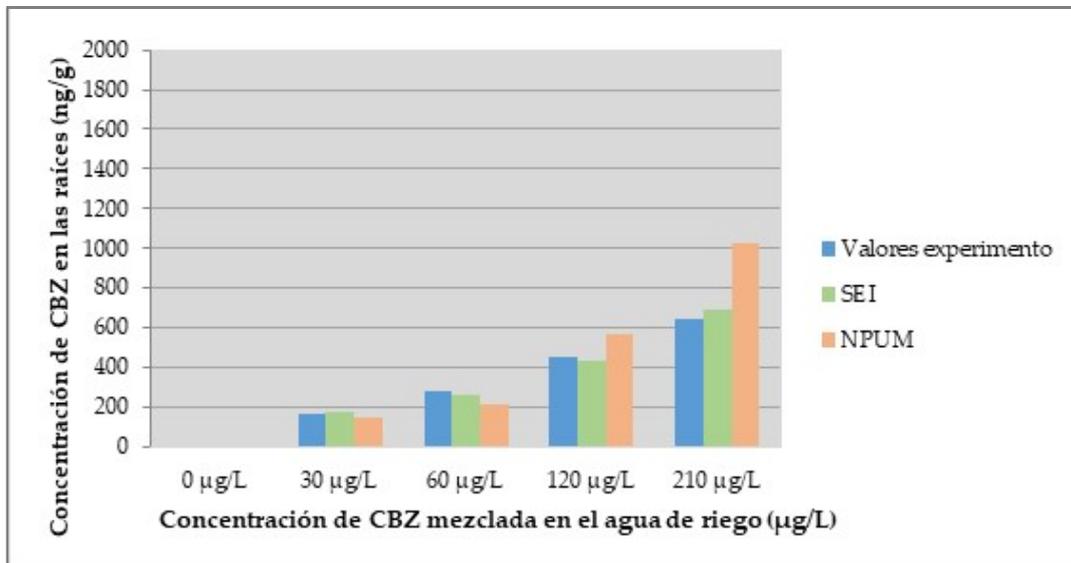


Figura 63. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las raíces de la lechuga Mini Romana var. Jabera, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

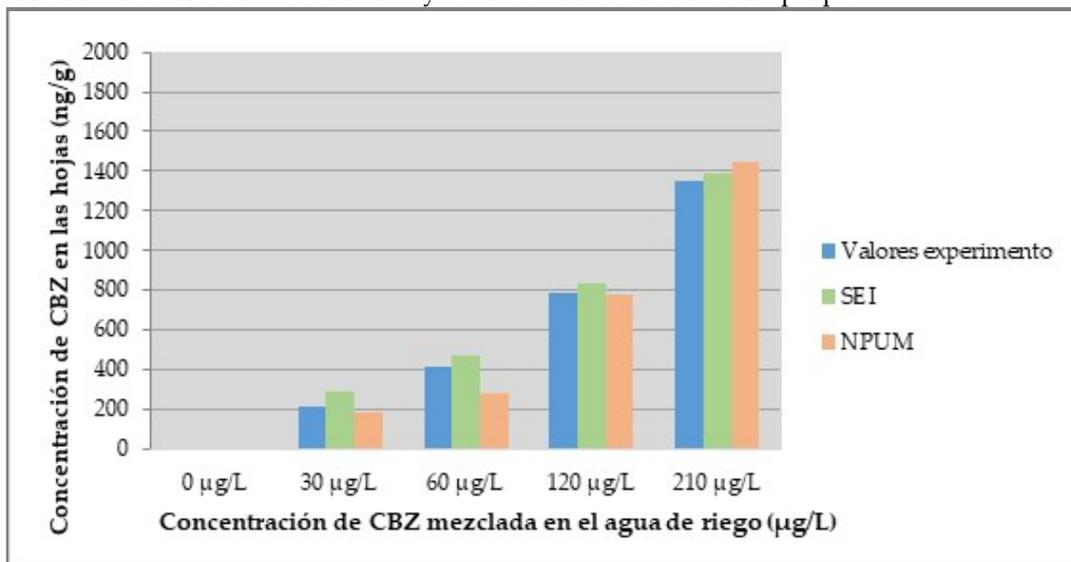


Figura 64. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las hojas de la lechuga Hoja de Roble var. Kiprien, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

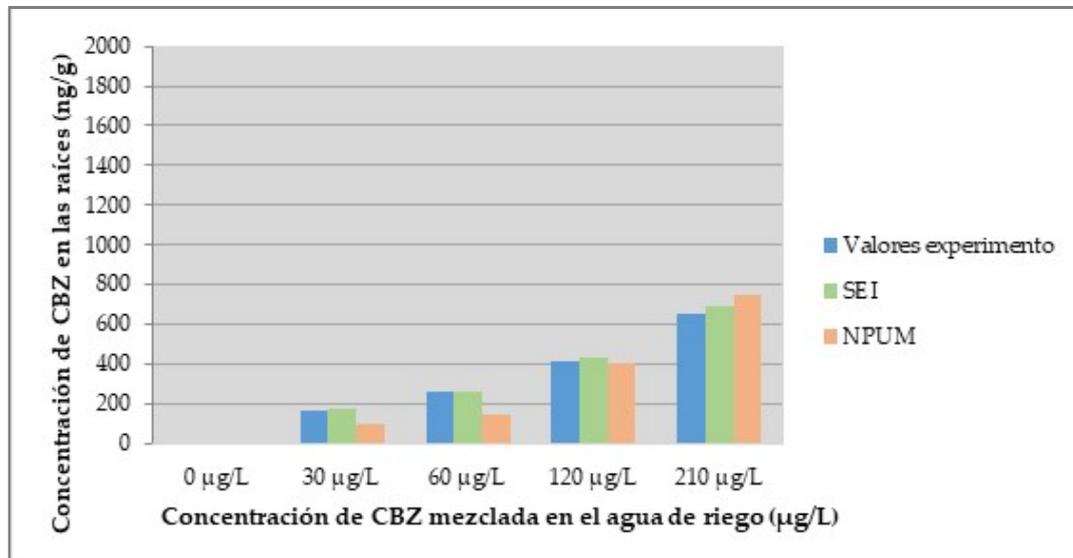


Figura 65. Gráfica comparativa de la concentración de CBZ en las raíces de la lechuga Hoja de Roble var. Kiprien, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

La concentración de CBZ en las hojas y raíces de las lechugas mostró una fuerte relación lineal con los valores de predicción resultantes en los dos modelos de simulación. Los coeficientes de determinación (R^2) obtuvieron valores superiores al 92% en hojas y raíces en la CBZ en el modelo de simulación NPUM (Anexo IV. Figuras A1 y A2) y unos valores superiores al 97% en hojas y raíces en la CBZ en el modelo de simulación SEI (Anexo IV. Figuras A5 y A6). Los dos modelos de simulación mostraron una relación lineal entre ellos con un coeficiente de determinación (R^2) del 94% (Anexo IV. Figuras A9 y A10).

En la predicción de la absorción del DCF en las hojas a una concentración de 30 $\mu\text{g L}^{-1}$ se observan valores de predicción más altos en el modelo de simulación NPUM que en el modelo de simulación SEI y no se observaron valores de captación de DCF en el experimento realizado en hojas a esa concentración (Figuras 66, 68 y 70).

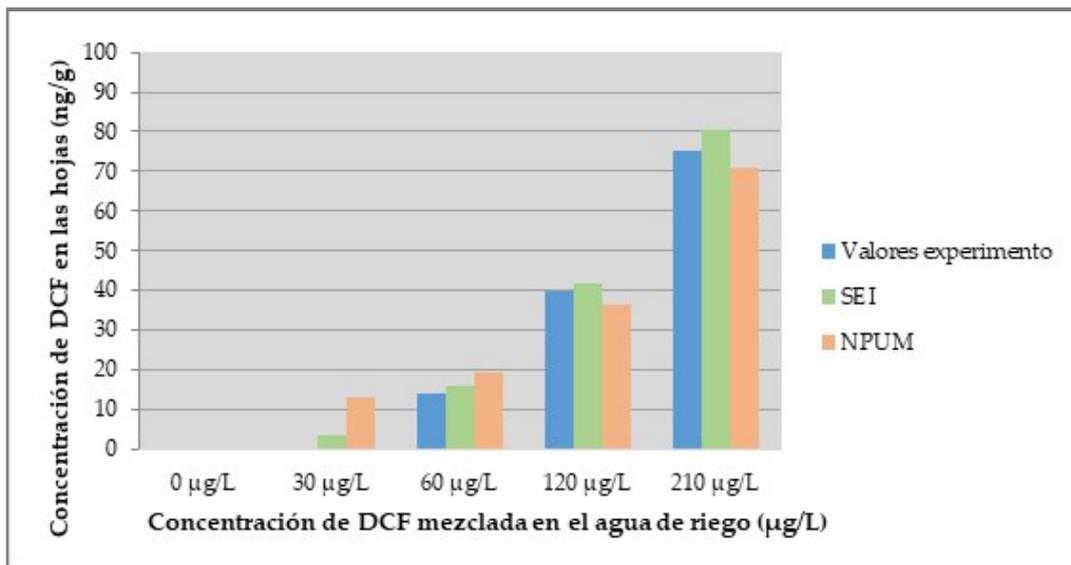


Figura 66. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las hojas de la lechuga Iceberg var. Gitana, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

En la predicción de la absorción del DCF en las raíces, los resultados obtenidos en el modelo de simulación SEI mostraron valores similares a los resultados obtenidos en el experimento, mientras que los valores obtenidos con el modelo NPUM mostraron una tendencia de predicción más alta a concentraciones de 210 $\mu\text{g L}^{-1}$ (Figuras 67, 69 y 71).

La concentración de DCF en las hojas y raíces de las lechugas mostró una buena relación lineal con los valores de predicción resultantes en los dos modelos de simulación. El coeficiente de determinación (R^2) en las hojas con el modelo de simulación NPUM mostró un buen ajuste con un valor del 86% y con un valor en las raíces del 94% (Anexo IV. Figuras A3 y A4). El modelo de simulación SEI mostró unos valores del coeficiente de determinación (R^2) superior al 97% en hojas y raíces (Anexo IV. Figuras A7 y A8). Los dos modelos de simulación mostraron una relación lineal entre ellos con un coeficiente de determinación (R^2) del 93% (Anexo IV. Figuras A11 y A12).

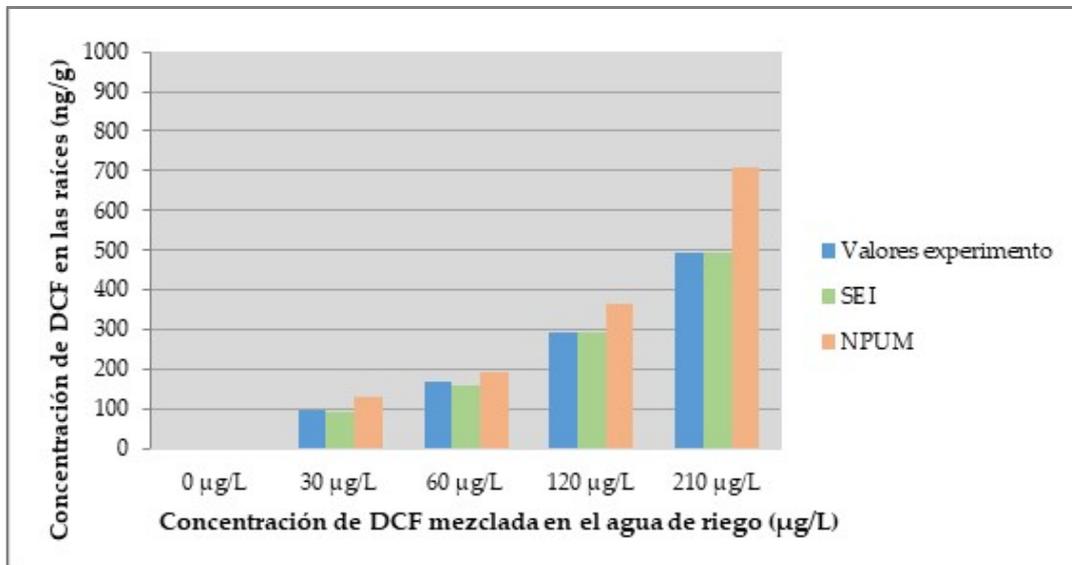


Figura 67. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las raíces de la lechuga Iceberg var. Gitana, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

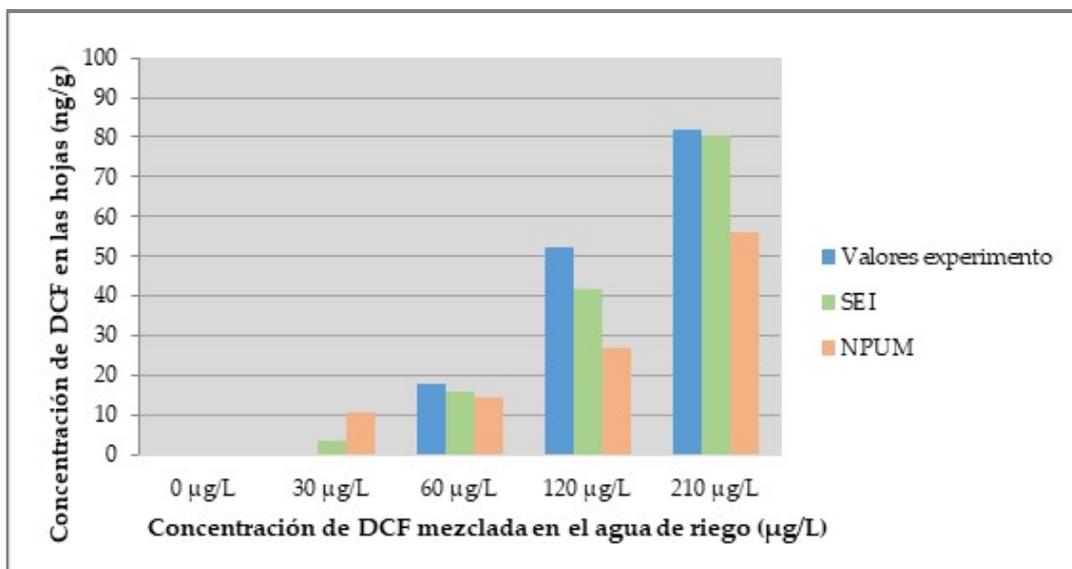


Figura 68. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las hojas de la lechuga Mini Romana var. Jabera, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

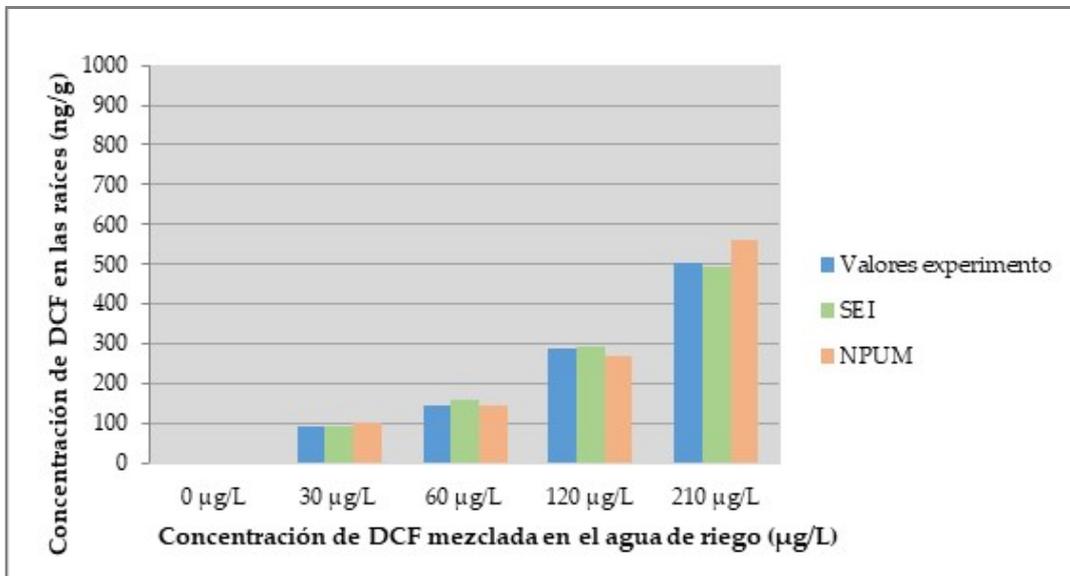


Figura 69. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las raíces de la lechuga Mini Romana var. Jabera, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

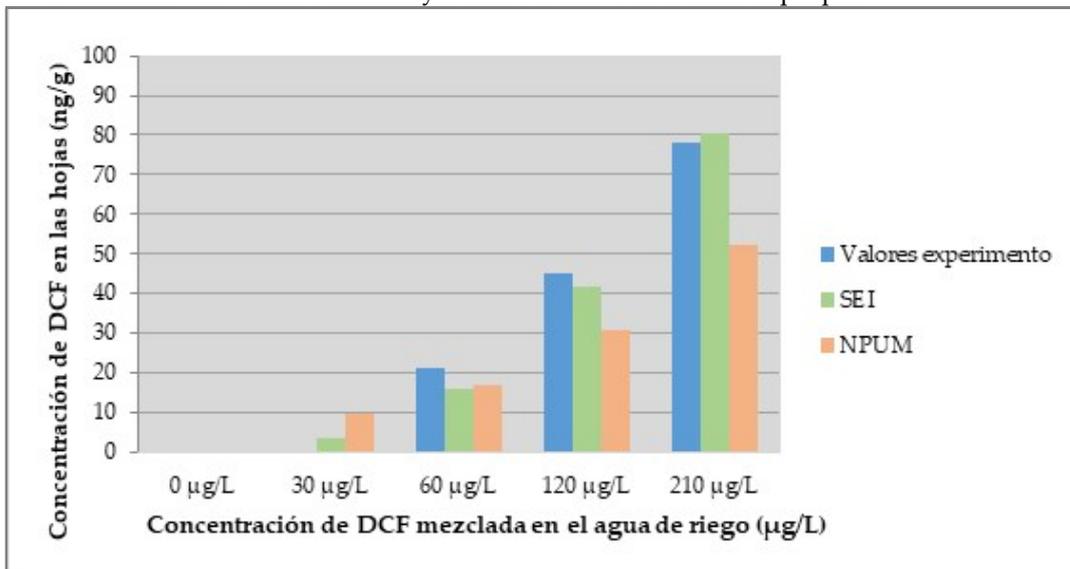


Figura 70. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las hojas de la lechuga Hoja de Roble var. Kiprien, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

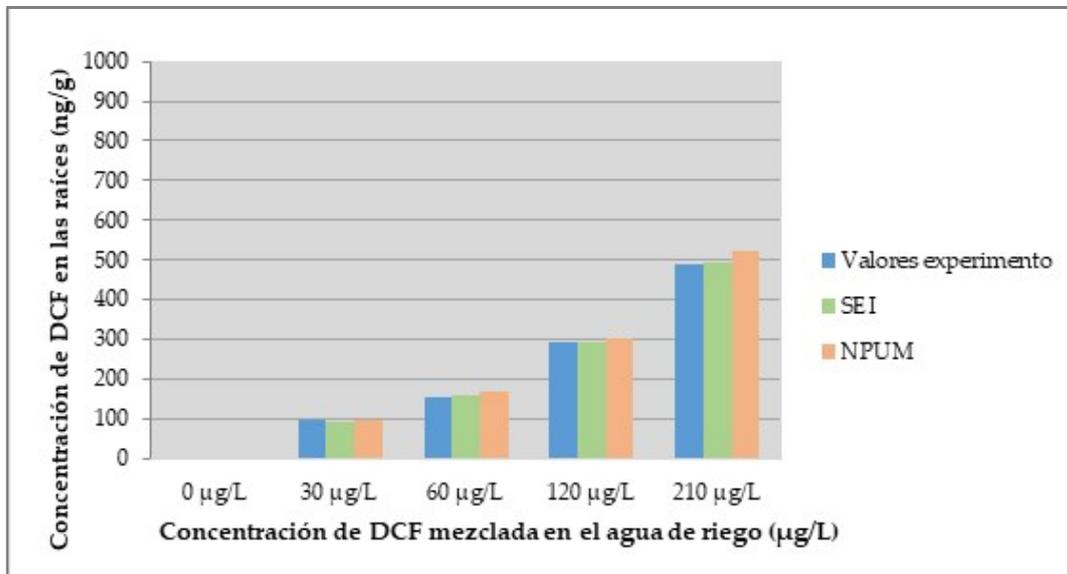


Figura 71. Gráfica comparativa de la concentración de DCF en las raíces de la lechuga Hoja de Roble var. Kiprien, de los valores obtenidos en el experimento y en la predicción de los dos modelos de simulación SEI y NPUM. Fuente: elaboración propia

El modelo de simulación SEI ha “aprendido” el comportamiento de la CBZ y DCF en la absorción en hojas y raíces de las lechugas a partir de los datos obtenidos en el segundo experimento realizado en invernadero en las tres variedades de lechuga. En el modelo de simulación NPUM, necesitamos introducir los valores de las propiedades físicoquímicas de los CEs que queremos predecir en la concentración de los tejidos de las lechugas. Además, hay que introducir unos parámetros propios del cultivo que estamos estudiando (en este caso lechugas) que no siempre se conocen en detalle y son variables en el tiempo. La comparación de los modelos de simulación mostró un buen ajuste en la predicción de las concentraciones de CEs en los tejidos de las lechugas permitiendo comprender los procesos subyacentes al transporte en la absorción del suelo y la planta, analizar los parámetros más relevantes (para un conjunto de datos dado), comprender la compleja interacción entre movimiento de agua, absorción de agua (en las plantas) y transporte químico.

6.2.2. Resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF realizados con el modelo de simulación SEI en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.

Una vez calibrado el modelo de predicción con los datos obtenidos del segundo experimento realizado en lechugas, se realizó una predicción con el modelo de simulación SEI y así obtener la acumulación de CBZ y DCF en los tejidos de las lechugas, si estas fueran cultivadas aprovechando el efluente como agua de riego de 10 EDAR representativas de la Región de Murcia (Figura 72).

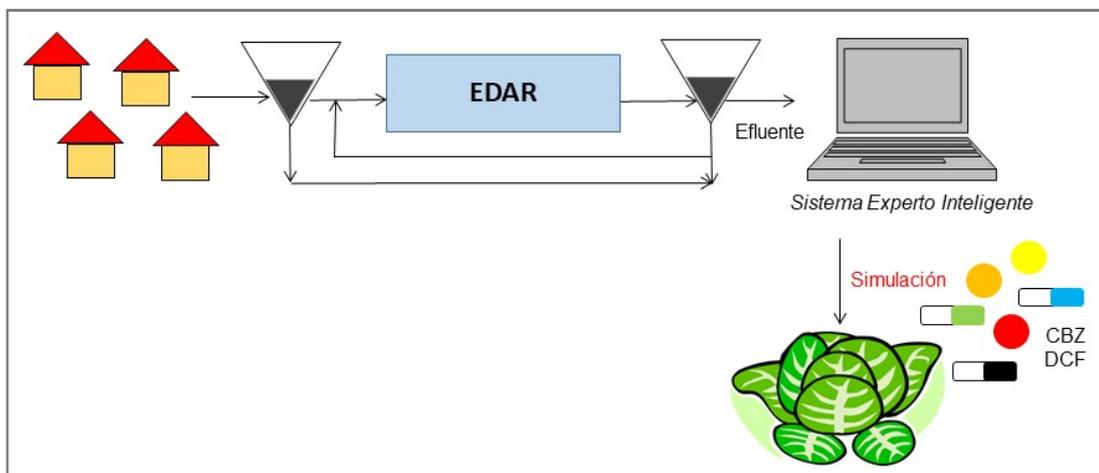


Figura 72. Predicción de acumulación de CE en lechugas a partir de un modelo de simulación SEI. Fuente: Elaboración propia

Teniendo en cuenta los resultados del segundo experimento con CBZ y DCF en los que se la mayor concentración de CE en las hojas se detectó en la variedad Mini Romana, se realizó la simulación de acumulación de CBZ y DCF en las lechugas variedad Mini Romana si estas fueran cultivadas utilizando el efluente de 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.

6.2.2.1. Predicción de CBZ y DCF en los tejidos vegetales de las lechugas

Los resultados se muestran en la siguiente tabla (Tabla 19) donde se pueden ver las predicciones de concentraciones de CBZ en las 10 EDAR estudiadas de la Región de Murcia.

Tabla 19. Tabla de predicción de concentración de CBZ en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia

EDAR	Hojas (ng g ⁻¹)	Raíces (ng g ⁻¹)
Alcantarilla (AL)	180,04	121,37
La Hoya - Lorca (LH)	170,77	117,08
Molina de Segura (MN)	106,74	87,46
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	115,63	91,58
Murcia Este (ME)	121,93	94,49
Caravaca de la Cruz (CC)	121,50	94,29
Puerto Lumbreras (PL)	193,83	127,74
San Javier (SJ)	119,15	93,21
Yecla (Y)	145,11	105,21
Cieza (Ci)	106,74	87,46

Como se puede observar en la anterior tabla (Tabla 19), las lechugas con mayor concentración en la predicción de CBZ en las hojas, fueron las EDAR de Alcantarilla, La Hoya (Lorca) y Puerto Lumbreras con unos valores de CBZ de 180,04, 170,77 y 193,83 ng·g⁻¹ respectivamente. En el resto de EDAR los valores oscilaron entre 100,00 y 150,00 ng·g⁻¹ de CBZ respectivamente.

En las EDAR de Molina de Segura y Cieza, el valor obtenido en la predicción es de 106,74 ng g⁻¹. En estas EDAR, se realizó un ajuste del modelo de predicción, debido a que la concentración detectada en el efluente de las EDAR estaba por debajo de los límites de detección (<0,012 µg L⁻¹) y por tanto la concentración de CBZ que se tomó en el valor de entrada del modelo de predicción fue igual a cero.

La ecuación que predice la acumulación de CBZ en las hojas es:

$$y = 6,1815x + 106,74 \quad \text{Ec. (25)}$$

Donde,

x= el valor de la concentración de CBZ en el efluente de las EDAR.

Esto explica porque a concentraciones de CBZ en el efluente igual a cero, el modelo de predicción obtiene un valor en hojas de $106,74 \text{ ng g}^{-1}$. Una vez ajustados los resultados obtenidos en el modelo de predicción en estas EDAR (concentración de CBZ en las hojas igual a cero), se puede ver en el siguiente mapa de predicción (Figura 73) las concentraciones obtenidas de CBZ en las hojas de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR.

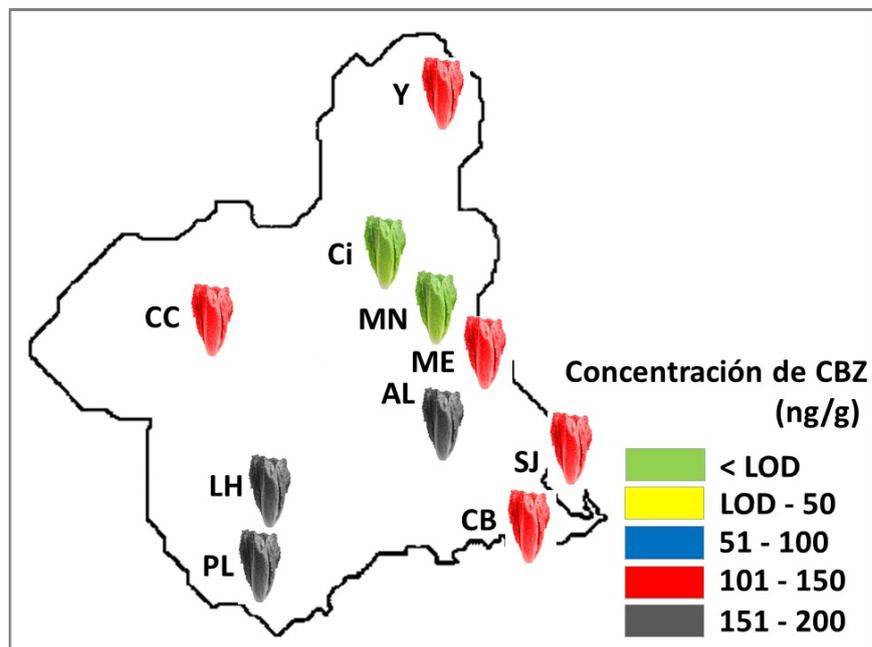


Figura 73. Mapa de predicción de la concentración de CBZ en las hojas de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Las lechugas con mayor concentración en la predicción de CBZ en las raíces (Tabla 19), fueron las EDAR de Alcantarilla, La Hoya (Lorca), Puerto Lumbreras y Yecla con unos valores de CBZ de $121,37$, $117,08$, $127,74$ y $105,21 \text{ ng}\cdot\text{g}^{-1}$ respectivamente. En el resto de EDAR los valores oscilaron entre $50,00$ y $100,00 \text{ ng}\cdot\text{g}^{-1}$ de CBZ respectivamente. En las EDAR de Molina de Segura y Cieza, el valor obtenido en la predicción es de $87,46 \text{ ng g}^{-1}$. En estas EDAR, al igual que como se explicó anteriormente en las hojas, se realizó un ajuste del modelo de predicción, debido a que la concentración detectada en el efluente de las EDAR estaba por debajo de los límites de detección ($<0,012 \mu\text{g L}^{-1}$) y por tanto la concentración de CBZ que se tomó en el valor de entrada del modelo de predicción fue igual a cero.

La ecuación que predice la acumulación de CBZ en las raíces es:

$$y = 2,8595 x + 87,46 \quad \text{Ec. (26)}$$

Donde,

x = el valor de la concentración de CBZ en el efluente de las EDAR.

Esto explica porque a concentraciones de CBZ en el efluente igual a cero, el modelo de predicción obtiene un valor en raíces de 87,46 ng g⁻¹. Una vez ajustados los resultados obtenidos en el modelo de predicción en estas EDAR (concentración de CBZ en las raíces igual a cero), se puede ver en el siguiente mapa de predicción (Figura 74) las concentraciones obtenidas de CBZ en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR.

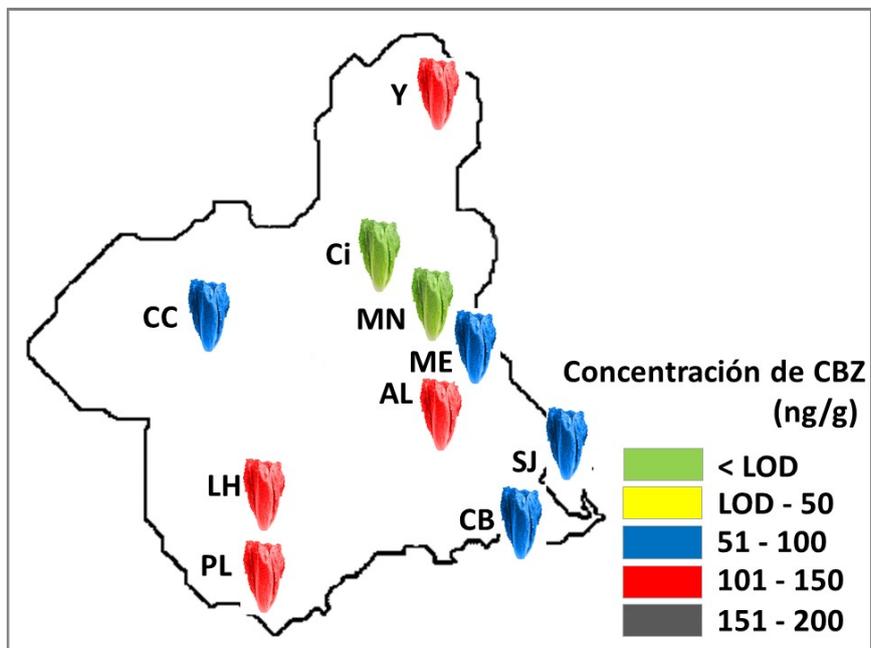


Figura 74. Mapa de predicción de la concentración de CBZ en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Con respecto a la concentración de DCF en las hojas de la lechuga que resultó de la predicción con el modelo de simulación, como se puede observar en el siguiente mapa de predicción (Figura 75), el valor en todas las EDAR fue igual a cero.

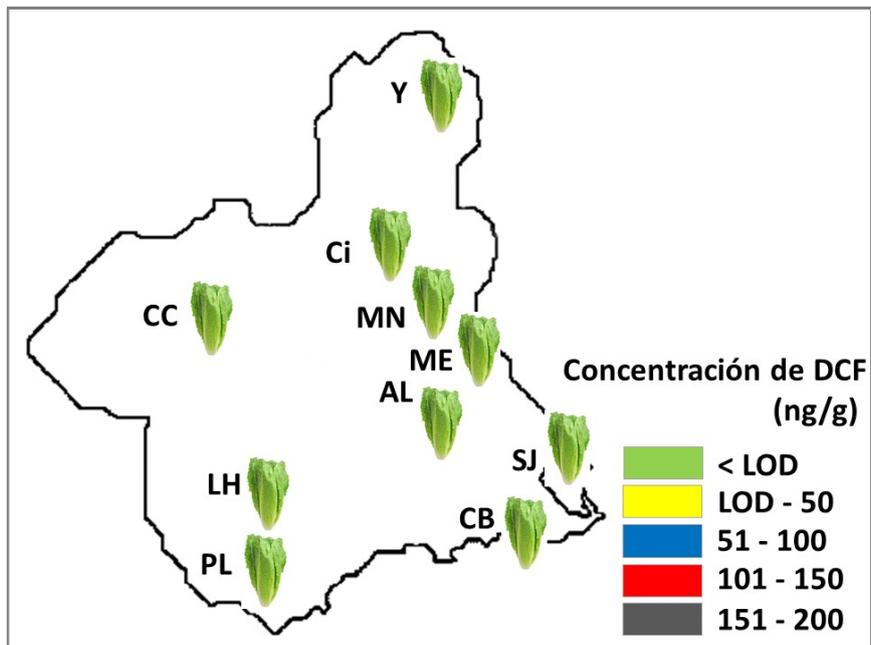


Figura 75. Mapa de predicción de la concentración de DCF en las hojas de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Analizando los resultados obtenidos en la predicción de acumulación de DCF en las raíces como se pueden observar en la siguiente tabla (Tabla 20) si se obtuvieron valores de concentración en las raíces de las lechugas de las EDAR, al contrario de los valores obtenidos en la predicción de DCF las hojas.

Tabla 20. Tabla de predicción de concentración de DCF en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia

EDAR	DCF (ng g ⁻¹)
Alcantarilla (AL)	26,65
La Hoya - Lorca (LH)	26,96
Molina de Segura (MN)	25,80
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	25,80
Murcia Este (ME)	26,63
Caravaca de la Cruz (CC)	25,80
Puerto Lumbreras (PL)	25,80
San Javier (SJ)	25,80
Yecla (Y)	25,80
Cieza (Ci)	25,80

Según los resultados obtenidos, en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya y Murcia Este, tenemos un valor comprendido entre 26,96 y 26,63 ng·g⁻¹. En el resto de EDAR estudiadas (Molina, Cabezo Beaza, Caravaca, Puerto Lumbreras, San Javier, Yecla y Cieza), el valor obtenido es 25,80 ng g⁻¹. En estas EDAR, se realizó un ajuste del modelo de predicción, debido a que la concentración detectada en el efluente de las EDAR estaba por debajo de los límites de detección (<0,012 µg L⁻¹) y por tanto la concentración de DCF que se tomó en el valor de entrada del modelo de predicción fue igual a cero.

La ecuación que predice la acumulación de DCF en las raíces es:

$$y = 2,2373 x + 25,80 \quad \text{Ec. (27)}$$

Donde,

x= el valor de la concentración de DCF en el efluente de las EDAR.

Esto explica porque a concentraciones de DCF en el efluente igual a cero, el modelo de predicción obtiene un valor de 25,80 ng g⁻¹. Una vez ajustados los resultados obtenidos en el modelo de predicción (concentración de DCF en las raíces igual a cero), se puede ver en el siguiente mapa de predicción (Figura 76) las concentraciones obtenidas de DCF en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR.

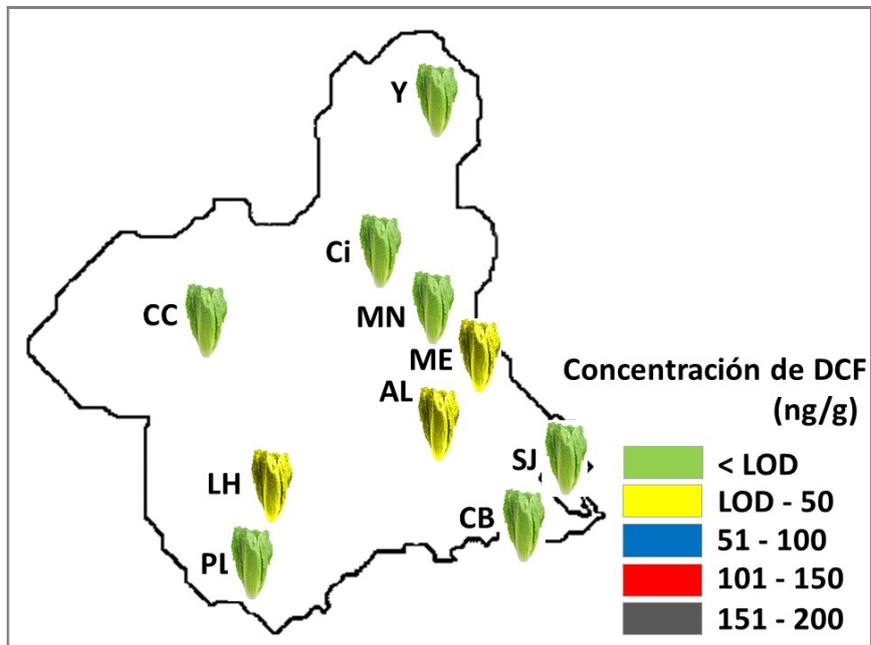


Figura 76. Mapa de predicción de la concentración de DCF en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR en la Región de Murcia. Fuente: Elaboración propia

Estos valores de predicción de CBZ y DCF confirman lo explicado anteriormente de la tendencia de los CE a su acumulación en cada parte de las plantas según las características físicoquímicas de los CE estudiados.

6.2.2.2. *Cálculo del Factor de Bioconcentración (BCF) en el cultivo de lechugas regadas con el efluente de 10 EDAR representativas de la Región de Murcia*

Tal y como hemos realizado con los resultados del segundo experimento, hemos calculado el BCF (Fórmula 23) partiendo de las concentraciones predecidas con el modelo de simulación SEI en el cultivo de lechuga en las 10 EDAR distribuidas por la Región de Murcia. Realizando este cálculo podemos apreciar la capacidad que tiene el CE de acumularse en el tejido vegetal de las lechugas (hojas y raíces) después de su absorción si fueran regadas con el efluente de las EDAR estudiadas. En la siguiente tabla (Tabla 21) tenemos los BCF de la CBZ y DCF en las hojas en el cultivo de lechuga de las 10 EDAR estudiadas.

Tabla 21. Tabla resumen de BCFs en hojas de CBZ y DCF

	CBZ BCF (L kg ⁻¹)	DCF BCF (L kg ⁻¹)
Alcantarilla (AL)	1,17	0,00
La Hoya - Lorca (LH)	1,27	0,00
Molina de Segura (MN)	0,00	0,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	6,13	0,00
Murcia Este (ME)	3,80	0,00
Caravaca de la Cruz (CC)	3,89	0,00
Puerto Lumbreras (PL)	1,06	0,00
San Javier (SJ)	4,54	0,00
Yecla (Y)	1,79	0,00
Cieza (Ci)	0,00	0,00

Los BCFs de la CBZ y DCF en las raíces en el cultivo de lechuga de las 10 EDAR estudiadas, pueden verse en la siguiente tabla (Tabla 22):

Tabla 22. Tabla resumen de BCFs en raíces de CBZ y DCF

	CBZ BCF (L kg ⁻¹)	DCF BCF (L kg ⁻¹)
Alcantarilla (AL)	0,79	5,26
La Hoya - Lorca (LH)	0,87	3,91
Molina de Segura (MN)	0,00	0,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	4,86	0,00
Murcia Este (ME)	2,94	5,39
Caravaca de la Cruz (CC)	3,02	0,00
Puerto Lumbreras (PL)	0,70	0,00
San Javier (SJ)	3,55	0,00
Yecla (Y)	1,30	0,00
Cieza (Ci)	0,00	0,00

Tal y como se puede observar, para la CBZ, los valores de BCF fueron más altos en las hojas que en las raíces. Los valores más altos de BCF de la CBZ en la lechuga se encontraron en las EDAR de Cabezo Beaza, San Javier, Caravaca y Murcia Este con unos valores comprendidos entre 6,13 y 3,80 ng g⁻¹ en el caso de las hojas y unos valores que van desde 4,86 y 2,94 ng g⁻¹ en el caso de las raíces. Las EDAR de Molina y Cieza mostraron un valor de BCF igual a cero en hojas y raíces en CBZ y DCF.

Los valores de BCF obtenidos en el DCF al contrario que en la CBZ, donde los valores de BCF en las hojas fueron cero y los valores de BCF en las raíces, tan solo se mostraron en las EDAR de Murcia Este, Alcantarilla y La Hoya con unos valores comprendidos entre 5,39 y 3,91 ng g⁻¹.

Estos resultados obtenidos de BCFs a partir de las concentraciones de CEs obtenidas por la predicción, coinciden con la tendencia mostrada en los valores de BCF obtenidos en el segundo experimento realizado.

6.2.2.3. Relación de la concentración Hoja/Raíz (C_{hoja}/C_{raiz})

Se calculó la relación de concentración hoja / raíz (C_{hoja} / C_{raiz}) (Fórmula 24) para evaluar el potencial de translocación de los dos CE estudiados a las raíces y hojas de las lechugas con los datos obtenidos según la predicción del modelo de simulación SEI en el cultivo de lechuga en las 10 EDAR distribuidas por la Región de Murcia. Como se puede observar en la Figura 77, en la CBZ la relación C_{hoja} / C_{raiz} fue mayor que en las EDAR estudiadas de la Región de Murcia excepto en Molina y Cieza. Los valores más altos se han mostrado en las EDAR de Alcantarilla (1,48), La Hoya (1,46) y Puerto Lumbreras (1,52). Esta relación mayor que uno, nos indica una buena translocación de la CBZ de la raíz a la hoja. Por el contrario, en el caso del DCF, las relaciones C_{hoja} / C_{raiz} mostraron valores igual a 0 en todas las EDAR. Este resultado es consecuencia de la predicción de la concentración de DCF en las hojas y raíces de la lechuga teniendo en cuenta la hipótesis que son regadas con el agua del efluente de dichas EDAR. El DCF tiene una translocación limitada y la translocación de las raíces a las hojas se considera un proceso pasivo que depende de las propiedades fisicoquímicas del mismo (Simonich y Hites, 1995). En el caso del DCF, los resultados de la C_{hoja} / C_{raiz} tienen un valor igual a 0 en todas las EDAR.

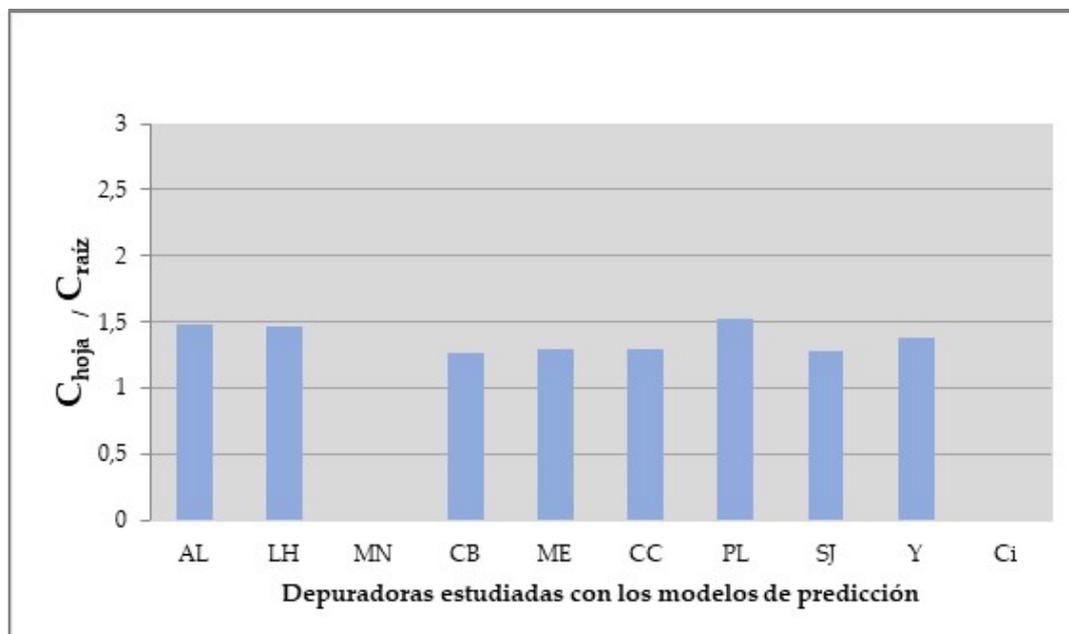


Figura 77. Relaciones de concentración de hoja / raíz en CBZ (C_{hoja} / C_{raiz}). Fuente: elaboración propia

6.2.2.4. *Cálculo del riesgo de consumo de lechugas regadas con agua procedente de EDAR para la salud humana*

Una vez realizada la predicción de acumulación de CBZ y DCF en las hojas y raíces de lechuga con el modelo de simulación SEI, se ha calculado si la acumulación de CBZ y DCF en las partes comestibles de las lechugas constituye un riesgo potencial para la salud humana debido a su incorporación a la cadena alimentaria en la hipótesis que se aprovecharan los efluentes de las EDAR estudiadas para el riego del cultivo de lechuga.

Para realizar esta evaluación, se tuvo en cuenta el peor escenario de exposición que se obtuvo en las predicciones de las concentraciones de CBZ en las hojas de lechuga correspondientes a la respuesta con las dosis de los CE detectadas en el efluente de las EDAR analizadas. En el DCF, las predicciones en la concentración de la parte comestible de las lechugas (hojas) fueron igual a cero y se realizaron los cálculos teniendo en cuenta la predicción de la concentración de DCF en las raíces. El cálculo se realizó siguiendo el método descrito en Hyland et al. (2015), en el cual la ingesta diaria humana de cada medicamento para cada variedad de lechuga se estimó multiplicando la concentración calculada para la porción comestible (ng g^{-1}) por el consumo medio de lechuga. ($9,00 \text{ g d}^{-1}$ para mujeres comprendidas entre 14 y 75 años con un peso corporal de 67,30 kg (Legind y Trapp, 2009)).

En la siguiente tabla (Tabla 23) se puede observar el consumo diario estimado de CBZ por EDAR.

Tabla 23. Tabla de la ingestión estimada de CBZ en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas

EDAR	Concentración de CBZ en raíces (ng·g ⁻¹)	Concentración de CBZ en hojas (ng·g ⁻¹)	Cantidad diaria de CBZ consumida en lechuga (ng) ^a	Consumo diario estimado de CBZ (ng·kg ⁻¹ , mujeres, peso 67,30kg) ^a	Consumo diario aceptable de CBZ (ng·kg ⁻¹ ·d ⁻¹) ^{a, b}
Alcantarilla (AL)	121,37	180,04	1620,36	24,07	340,00
La Hoya - Lorca (LH)	117,08	170,77	1536,93	22,83	340,00
Molina de Segura (MN)	0	0	0	0	340,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	91,58	115,63	1040,67	15,46	340,00
Murcia Este (ME)	94,49	121,93	1097,37	16,30	340,00
Caravaca de la Cruz (CC)	94,29	121,50	1093,50	16,24	340,00
Puerto Lumbreras (PL)	127,74	193,83	1744,47	25,92	340,00
San Javier (SJ)	93,21	119,15	1072,35	15,93	340,00
Yecla (Y)	105,21	145,11	1305,99	19,40	340,00
Cieza (Ci)	0	0	0	0	340,00

^a Calculado con la parte comestible de las lechugas^b Bruce et al., 2010

Tomando en consideración las ingestas diarias aceptables para CBZ y DCF (Bruce et al., 2010), que indican la cantidad máxima de CE que una persona puede ingerir por día, se han calculado las cantidades estimadas de CE ingeridas por día y se ha obtenido que en el caso de la CBZ son por debajo de los límites aceptables (340,00 ng·kg⁻¹·d⁻¹) si se consumieran las hojas de lechuga y en el DCF, la cantidad diaria estimada ingerida está muy por debajo de los límites aceptables (67.000,00 ng·kg⁻¹·d⁻¹) si se consumieran las raíces de lechuga (Se ha realizado con las raíces al no detectarse concentración de DCF en las hojas) (Tabla 24) en la hipótesis que se regaran con los efluentes de las EDAR estudiadas.

Tabla 24. Tabla de la ingestión estimada de DCF en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas

EDAR	Concentración de DCF en raíces (ng·g ⁻¹)	Concentración de DCF en hojas (ng·g ⁻¹)	Cantidad diaria de DCF consumida en lechuga (ng) ^a	Consumo diario estimado de DCF (ng·kg ⁻¹ , mujeres, peso 67,30kg) ^a	Consumo diario aceptable de DCF (ng·kg ⁻¹ ·d ⁻¹) ^{a, b}
Alcantarilla (AL)	26,65	0	239,85	3,56	67.000,00
La Hoya - Lorca (LH)	26,96	0	242,64	3,60	67.000,00
Molina de Segura (MN)	0	0	0	0	67.000,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	0	0	0	0	67.000,00
Murcia Este (ME)	26,63	0	239,67	3,56	67.000,00
Caravaca de la Cruz (CC)	0	0	0	0	67.000,00
Puerto Lumbreras (PL)	0	0	0	0	67.000,00
San Javier (SJ)	0	0	0	0	67.000,00
Yecla (Y)	0	0	0	0	67.000,00
Cieza (Ci)	0	0	0	0	67.000,00

^a Calculado con las raíces de las lechugas^b Bruce et al., 2010

Si analizamos en que EDAR consumiríamos más concentración de CBZ, podemos observar que sería con las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de Puerto Lumbreras, Alcantarilla y La Hoya. En el DCF, las EDAR en las que encontraríamos concentración de DCF serían La Hoya, Alcantarilla y Murcia Este. Tal y como hemos explicado anteriormente, en ningún caso supondría ningún riesgo para la salud humana al estar muy por debajo de los límites aceptables. Por tanto, podríamos aprovechar los efluentes de las EDAR estudiadas como agua de riego para el cultivo de las lechugas sin que esta práctica supusiera riesgo alguno para la salud humana al incorporar dichos CEs en la cadena alimentaria consumiendo dichas lechugas.

6.2.3. Resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF en las EDAR realizados con el modelo de simulación NPUM en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.

Al igual que se realizó con el modelo de simulación SEI, se calibró este modelo de predicción con los datos obtenidos del segundo experimento realizado en lechugas. Se realizó una predicción con el modelo NPUM (Figura 78) y así obtener la acumulación de CBZ y DCF en los tejidos de las lechugas, si estas fueran cultivadas aprovechando el efluente como agua de riego de 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.

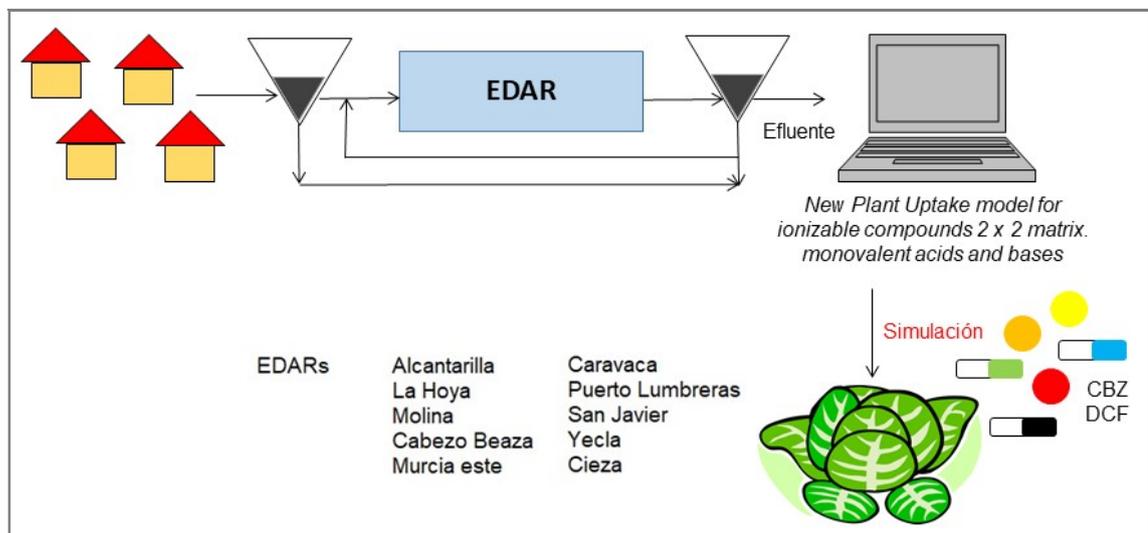


Figura 78. Predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechugas a partir del modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

Teniendo en cuenta los resultados del segundo experimento con CBZ y DCF en los que se la mayor concentración de CE en las hojas se detectó en la variedad Mini Romana, se realizó la simulación de acumulación de CBZ y DCF en la lechuga variedad Mini Romana si fuera cultivada utilizando el efluente de 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.

6.2.3.1. Predicción de CBZ y DCF en los tejidos vegetales de las lechugas

Los resultados se muestran en los siguientes mapas de predicción (Figuras 79 - 82) donde se pueden ver las predicciones de concentraciones de CBZ y DCF en las 10 EDAR estudiadas de la Región de Murcia.

Como se puede observar en la figura 79, las lechugas con mayor concentración en la predicción de CBZ en las hojas, fueron las EDAR de Alcantarilla, La Hoya (Lorca) y Puerto Lumbreras con unos valores de CBZ de 77,30, 67,03 y 92,33 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ respectivamente. En las de EDAR de Cabezo Beaza, Murcia Este, Caravaca, San Javier y Yecla, los valores oscilaron entre 50,00 y 100,00 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ de CBZ respectivamente.

En las EDAR de Molina de Segura y Cieza, el valor obtenido en la predicción es de 0 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$, debido a que la concentración detectada en el efluente de estas EDAR estaba por debajo de los límites de detección ($<0,012\ \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) y por tanto la concentración de CBZ que se tomó en el valor de entrada del modelo de predicción fue igual a cero.

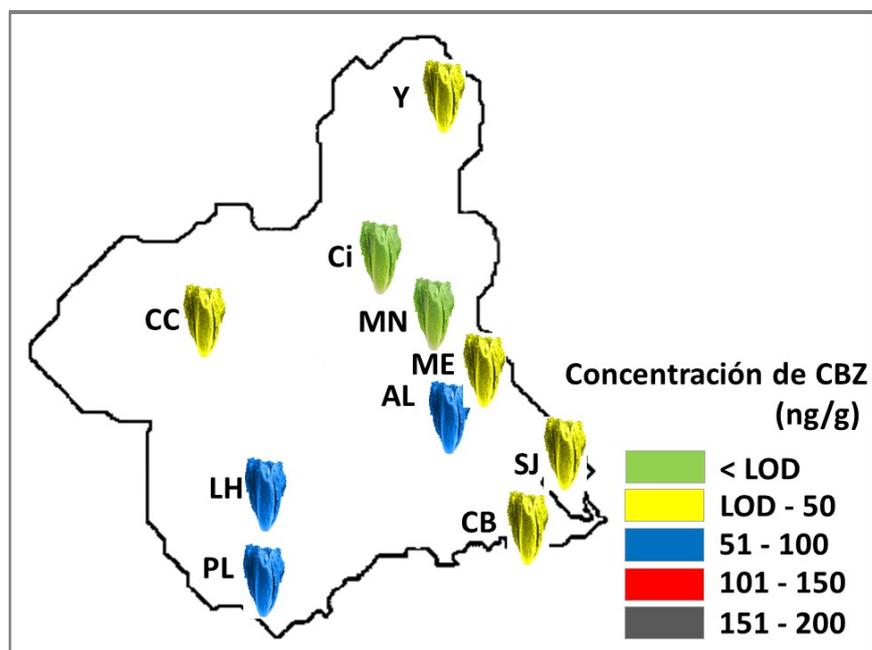


Figura 79. Mapa de predicción de la concentración de CBZ en las hojas de las lechugas de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Con respecto a los resultados obtenidos en la predicción de CBZ en las raíces (Figura 80), en las EDAR de Molina de Segura y Cieza la concentración detectada en el efluente de las EDAR estaba por debajo de los límites de detección ($<0,012 \mu\text{g L}^{-1}$) y por tanto la concentración de CBZ que se tomó en el valor de entrada del modelo de predicción fue igual a cero. En el resto de EDAR estudiadas, los valores de predicción obtenidos fueron menores de $50,00 \text{ ng}\cdot\text{g}^{-1}$ de CBZ, destacando con las concentraciones más altas las EDAR de Alcantarilla, La Hoya (Lorca) y Puerto Lumbreras con unos valores de CBZ en raíces de $40,07$, $34,70$ y $47,83 \text{ ng}\cdot\text{g}^{-1}$ respectivamente.

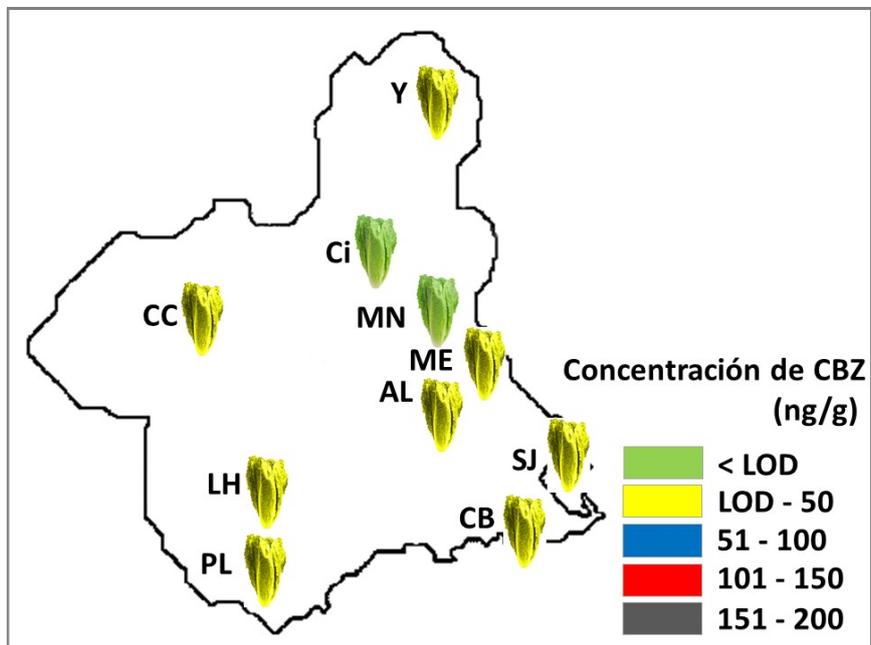


Figura 80. Mapa de predicción de la concentración de CBZ en las raíces de las lechugas de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Analizando los resultados de la concentración de DCF en las hojas de la lechuga que resultó de la predicción con el modelo de simulación, como se puede observar en el siguiente mapa de predicción (Figura 81), los valores en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya y Murcia Este, fueron prácticamente cero con unos valores de 0,10, 0,10 y 0,13 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ respectivamente. En el resto de EDAR, los valores fueron igual a cero.

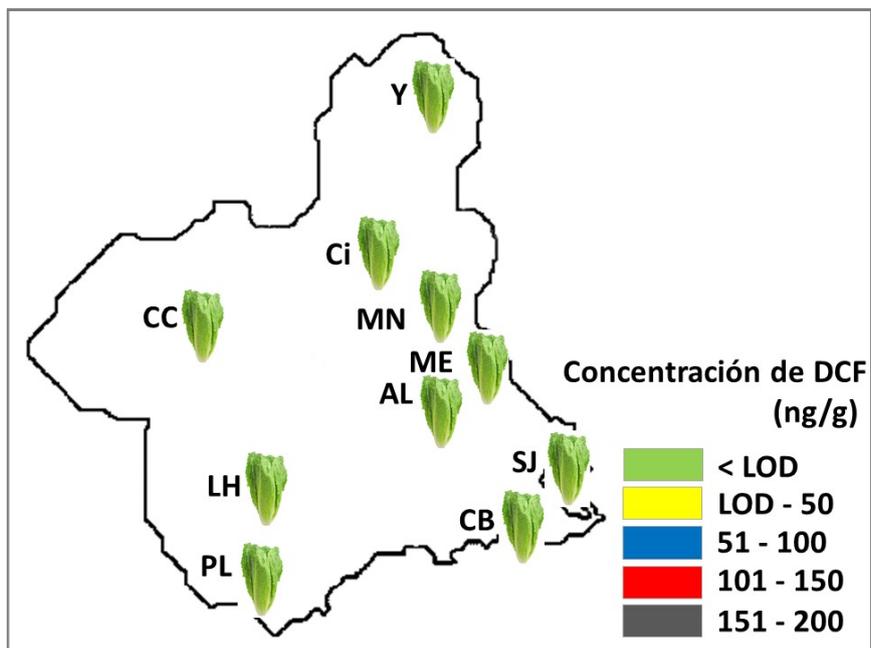


Figura 81. Mapa de predicción de la concentración de DCF en las hojas de las lechugas de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

En los resultados obtenidos de la predicción de acumulación de DCF en las raíces como se pueden observar en el siguiente mapa de predicción (Figura 82) se obtuvieron valores muy bajos de concentración en las raíces de las lechugas.

En concreto, en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya y Murcia Este se obtuvieron unos valores de DCF en raíces de 0,77, 0,97 y 1,13 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$. En el resto de EDAR estudiadas (Molina, Cabezo Beaza, Caravaca, Puerto Lumbreras, San Javier, Yecla y Cieza), el valor obtenido en la predicción de la concentración de DCF en raíces es de 0 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$, debido a que la concentración detectada en el efluente de estas EDAR estaba por debajo de los límites de detección ($<0,012\ \mu\text{g}\ \text{L}^{-1}$) y por tanto la concentración de DCF que se tomó en el valor de entrada del modelo de predicción fue igual a cero.

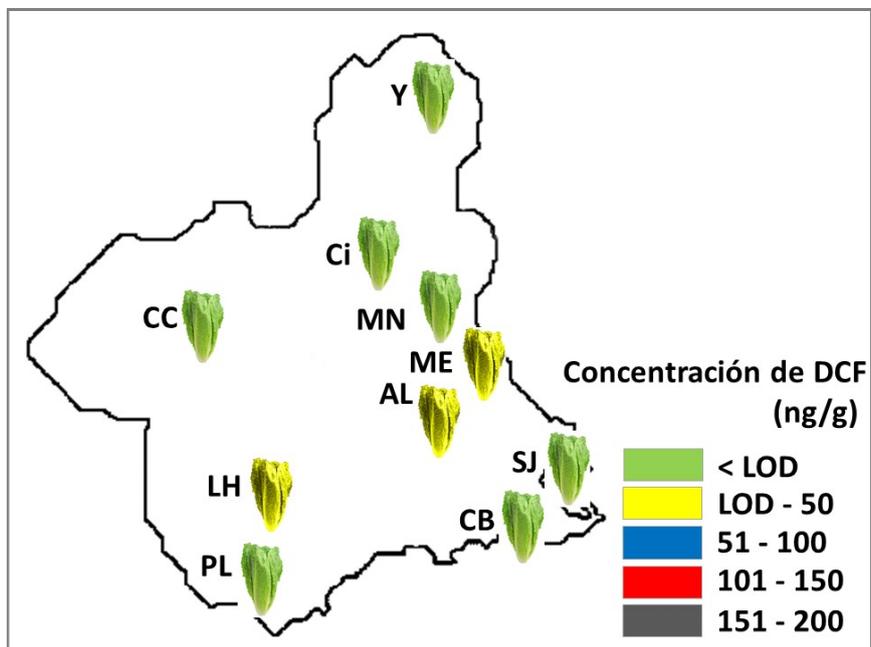


Figura 82. Mapa de predicción de la concentración de DCF en las raíces de las lechugas de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Estos resultados de predicción confirman lo explicado anteriormente respecto a la tendencia de estos dos CE a su acumulación en hojas y raíces dependiendo de las características físicoquímicas de cada uno.

6.2.3.2. *Cálculo del Factor de Bioconcentración (BCF) en el cultivo de lechugas regadas con el efluente de 10 EDAR de la Región de Murcia*

Se ha calculado el Factor de Bioconcentración (BCF) (Fórmula 23) partiendo de las concentraciones predecidas con el modelo de simulación NPUM, en el cultivo de lechuga en las 10 EDAR distribuidas por la Región de Murcia. Al igual que se ha calculado anteriormente, realizando este cálculo se puede apreciar la capacidad que tiene el CE de acumularse en el tejido vegetal de las lechugas (hojas y raíces) después de su absorción en el caso que fueran regadas con el efluente de las EDAR estudiadas. En la siguiente tabla tenemos los Factores de Bioconcentración de la CBZ y DCF en las hojas en el cultivo de lechuga de las 10 EDAR estudiadas.

Tabla 25. Tabla resumen de BCFs en hojas de CBZ y DCF en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia

	CBZ BCF (L kg ⁻¹)	DCF BCF (L kg ⁻¹)
Alcantarilla (AL)	0,50	0,02
La Hoya - Lorca (LH)	0,50	0,01
Molina de Segura (MN)	0,00	0,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	0,78	0,00
Murcia Este (ME)	0,66	0,03
Caravaca de la Cruz (CC)	0,69	0,00
Puerto Lumbreras (PL)	0,50	0,00
San Javier (SJ)	0,76	0,00
Yecla (Y)	0,52	0,00
Cieza (Ci)	0,00	0,00

En la siguiente tabla muestra los Factores de Bioconcentración de la CBZ y DCF en las raíces en el cultivo de lechuga de las 10 EDAR estudiadas.

Tabla 26. Tabla resumen de BCFs en raíces de CBZ y DCF en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia

	CBZ BCF (L kg ⁻¹)	DCF BCF (L kg ⁻¹)
Alcantarilla (AL)	0,26	0,15
La Hoya - Lorca (LH)	0,26	0,14
Molina de Segura (MN)	0,00	0,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	0,41	0,00
Murcia Este (ME)	0,34	0,23
Caravaca de la Cruz (CC)	0,36	0,00
Puerto Lumbreras (PL)	0,26	0,00
San Javier (SJ)	0,39	0,00
Yecla (Y)	0,27	0,00
Cieza (Ci)	0,00	0,00

Tal y como se puede observar en los resultados de las dos tablas, en la CBZ, los valores de BCF fueron más altos en las hojas que en las raíces. Los valores más altos de BCF de la CBZ en la lechuga se encontraron en las EDAR de Cabezo Beaza, San Javier, Caravaca y Murcia Este con unos valores comprendidos entre 0,78 y 0,66 en el caso de las hojas y unos valores que van desde 0,41 y 0,34 en el caso de las raíces. Las EDAR de Molina y Cieza mostraron un valor de BCF igual a cero.

Los valores de BCF en el DCF fueron muy próximos a cero tanto en hojas como en raíces. Se repite el comportamiento observado anteriormente, donde los valores de BCF en las raíces fueron superiores que en las raíces. Los valores más altos de BCF en las raíces se mostraron en las EDAR de Murcia Este, Alcantarilla y La Hoya con unos valores comprendidos entre 0,23 y 0,14. En las hojas los valores en las EDAR mencionadas anteriormente estaban comprendidos entre 0,03 y 0,01.

Estos resultados obtenidos de BCFs a partir de las concentraciones de CEs obtenidas por la predicción, coinciden con la tendencia mostrada en los valores de BCF obtenidos en el segundo experimento.

6.2.3.3. Relación de la concentración Hoja/Raíz (C_{hoja}/C_{raiz})

Se ha calculado la relación de concentración hoja / raíz (C_{hoja} / C_{raiz}) (Fórmula 24) para evaluar el potencial de translocación de los dos CE estudiados a las raíces y hojas de las lechugas con los datos obtenidos según la predicción del modelo de simulación NPUM en el cultivo de lechuga en las 8 de las 10 EDAR distribuidas por la Región de Murcia. Como se puede observar en la (Figura 83), en la CBZ la relación C_{hoja} / C_{raiz} fue mayor que 1,5 en 8 EDAR estudiadas de la Región de Murcia excepto en Molina y Cieza que fueron igual a 0. Los valores mostrados en las EDAR fueron muy homogéneos. La relación mayor que uno, nos indica una buena translocación de la CBZ de la raíz a la hoja. Por el contrario, en el caso del DCF, las relaciones C_{hoja} / C_{raiz} mostraron valores igual a 0 en todas las EDAR. Este resultado es consecuencia de la predicción de la concentración de DCF en las hojas y raíces de la lechuga teniendo en cuenta la hipótesis que son regadas con el agua del efluente de dichas EDAR. El DCF tiene un comportamiento de translocación limitado y la translocación de las raíces a las hojas se considera un proceso pasivo que depende de las propiedades fisicoquímicas del CE (Simonich y Hites, 1995).

En la siguiente gráfica podemos ver los resultados de la C_{hoja} / C_{raiz} de la CBZ en el agua de riego en las lechugas. En el caso del DCF, los resultados de la C_{hoja} / C_{raiz} tienen un valor igual a 0 en todas las EDAR.

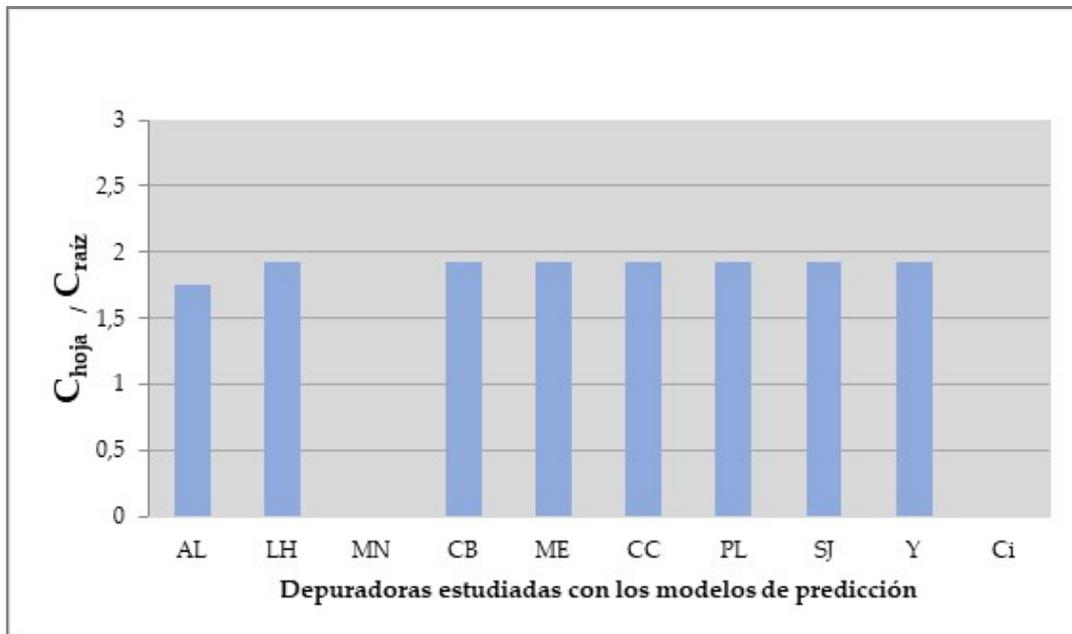


Figura 83. Relaciones de concentración de hoja / raíz en CBZ ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$). Fuente: elaboración propia

6.2.3.4. Cálculo del riesgo de consumo de lechugas regadas con agua procedente de EDAR para la salud humana

Una vez realizada la predicción de acumulación de CBZ y DCF en las hojas y raíces de lechuga con el modelo de simulación NPUM, se ha calculado si la acumulación de CBZ y DCF en las partes comestibles de las lechugas constituye un riesgo potencial para la salud humana debido a su incorporación a la cadena alimentaria en la hipótesis que se aprovecharan los efluentes de las EDAR estudiadas para el riego del cultivo de lechuga.

Para realizar esta evaluación, se tuvo en cuenta el peor escenario de exposición que se obtuvo en las predicciones de las concentraciones de CBZ en las hojas de lechuga correspondientes a la respuesta con las dosis de CEs detectadas en el efluente de las EDAR analizadas. En el DCF, en las predicciones en la concentración tanto en hojas como en raíces se obtuvieron unos valores próximos a cero (se ha realizado la evaluación teniendo en cuenta la concentración de DCF en las hojas). El cálculo se realizó siguiendo el método descrito en Hyland et al. (2015), en el cual la ingesta diaria humana de cada medicamento para cada variedad de lechuga se estimó multiplicando la concentración calculada para la porción comestible (ng g^{-1}) por el consumo medio de lechuga. ($9,00 \text{ g d}^{-1}$ para mujeres comprendidas entre 14 y 75 años con un peso corporal de 67,30 kg (Legind y Trapp, 2009)). En la siguiente tabla (Tabla 27) se puede observar el consumo diario estimado de CBZ por EDAR.

Tabla 27. Tabla de la ingestión estimada de CBZ en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas según las predicciones del modelo NPUM

EDAR	Concentración de CBZ en raíces (ng·g ⁻¹)	Concentración de CBZ en hojas (ng·g ⁻¹)	Cantidad diaria de CBZ consumida en lechuga (ng) ^a	Consumo diario estimado de CBZ (ng·kg ⁻¹ , mujeres, peso 67,30kg) ^a	Consumo diario aceptable de CBZ (ng·kg ⁻¹ ·d ⁻¹) ^{a, b}
Alcantarilla (AL)	40,07	77,30	695,70	10,33	340,00
La Hoya - Lorca (LH)	34,70	67,03	603,27	8,96	340,00
Molina de Segura (MN)	0	0	0	0	340,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	7,67	14,73	132,57	1,96	340,00
Murcia Este (ME)	10,97	21,13	190,17	2,82	340,00
Caravaca de la Cruz (CC)	11,17	21,57	194,13	2,88	340,00
Puerto Lumbreras (PL)	47,83	92,33	830,97	12,34	340,00
San Javier (SJ)	10,30	19,90	179,10	2,66	340,00
Yecla (Y)	21,93	42,37	381,33	5,66	340,00
Cieza (Ci)	0	0	0	0	340,00

^a Calculado con la parte comestible de las lechugas

^b Bruce et al., 2010

Tomando en consideración las ingestas diarias aceptables para CBZ y DCF (Bruce et al., 2010), que indican la cantidad máxima de CE que una persona puede ingerir por día, se han calculado las cantidades estimadas de CE ingeridas por día y se ha obtenido que en el caso de la CBZ están por debajo de los límites aceptables (340,00 ng·kg⁻¹·d⁻¹) si se consumieran las hojas de lechuga y en el DCF, la cantidad diaria estimada ingerida es prácticamente cero si se consumieran las hojas de lechuga (Tabla 28) en la hipótesis que se regaran con los efluentes de las EDAR estudiadas.

Tabla 28. Tabla de la ingestión estimada de DCF en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas según las predicciones del modelo NPUM

EDAR	Concentración de DCF en raíces (ng·g ⁻¹)	Concentración de DCF en hojas (ng·g ⁻¹)	Cantidad diaria de DCF consumida en lechuga (ng) ^a	Consumo diario estimado de DCF (ng·kg ⁻¹ , mujeres, peso 67,30kg) ^a	Consumo diario aceptable de DCF (ng·kg ⁻¹ ·d ⁻¹) ^{a, b}
Alcantarilla (AL)	0,77	0,10	0,90	0,01	67.000,00
La Hoya - Lorca (LH)	0,97	0,10	0,90	0,01	67.000,00
Molina de Segura (MN)	0	0	0	0	67.000,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	0	0	0	0	67.000,00
Murcia Este (ME)	1,13	0,13	1,17	0,01	67.000,00
Caravaca de la Cruz (CC)	0	0	0	0	67.000,00
Puerto Lumbreras (PL)	0	0	0	0	67.000,00
San Javier (SJ)	0	0	0	0	67.000,00
Yecla (Y)	0	0	0	0	67.000,00
Cieza (Ci)	0	0	0	0	67.000,00

^a Calculado con la parte comestible de las lechugas

^b Bruce et al., 2010

Si analizamos que EDAR consumiríamos más concentración de CBZ, podemos observar que sería con las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de Puerto Lumbreras, Alcantarilla y La Hoya. En las EDAR de Molina y Cieza los valores consumidos de CBZ serían igual a cero al no detectarse concentración de CBZ en el agua de riego. En el DCF, los valores son igual a cero salvo en las EDAR de La Hoya, Alcantarilla y Murcia Este, con unos valores insignificantes (prácticamente igual a cero). Tal y como hemos explicado anteriormente, en ningún caso supondría ningún riesgo para la salud humana y por tanto, podemos aprovechar los efluentes de las EDAR como agua de riego para el cultivo de las lechugas sin que esta práctica suponga riesgo alguno para la salud humana al incorporar dichos CE en la cadena alimentaria consumiendo dichas lechugas.

6.2.4. Comparativa entre los resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF realizados en un modelo basado en los modelos de simulación SEI y NPUM en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia

Con los resultados obtenidos de las predicciones en los dos apartados anteriores para obtener la acumulación de CBZ y DCF en los tejidos de las lechugas, si estas fueran cultivadas aprovechando el efluente como agua de riego de 10 EDAR representativas de la Región de Murcia, se realizó una comparativa entre los dos modelos de predicción para analizar las diferencias obtenidas entre ellos (Figura 84).

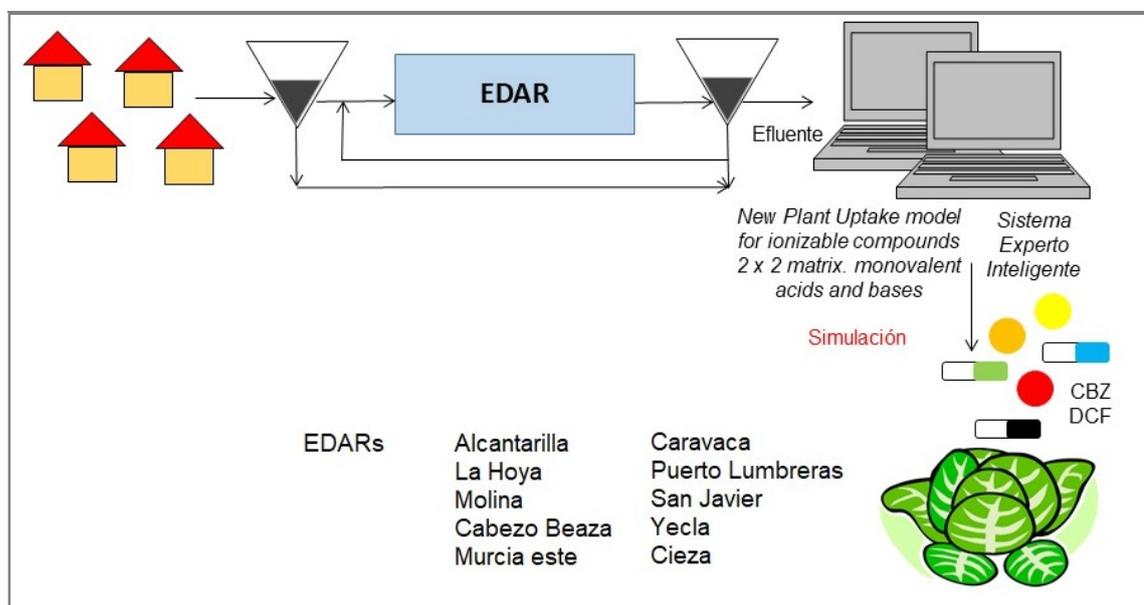


Figura 84. Comparativa de predicción de acumulación de CBZ y DCF en lechugas entre los modelos de simulación SEI y NPUM en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Esta comparativa entre los resultados de predicción de los dos modelos se realizó para la lechuga variedad Mini Romana, debido a que fue la variedad de lechuga que mostró mayor concentración de CE en las hojas en el segundo experimento.

6.2.4.1. Predicción de CBZ y DCF en los tejidos vegetales de las lechugas

Los resultados obtenidos en la concentración de CBZ en las hojas de las lechugas tal y como se puede apreciar en la siguiente gráfica (Figura 85) son más altos en el modelo SEI que en el modelo NPUM.

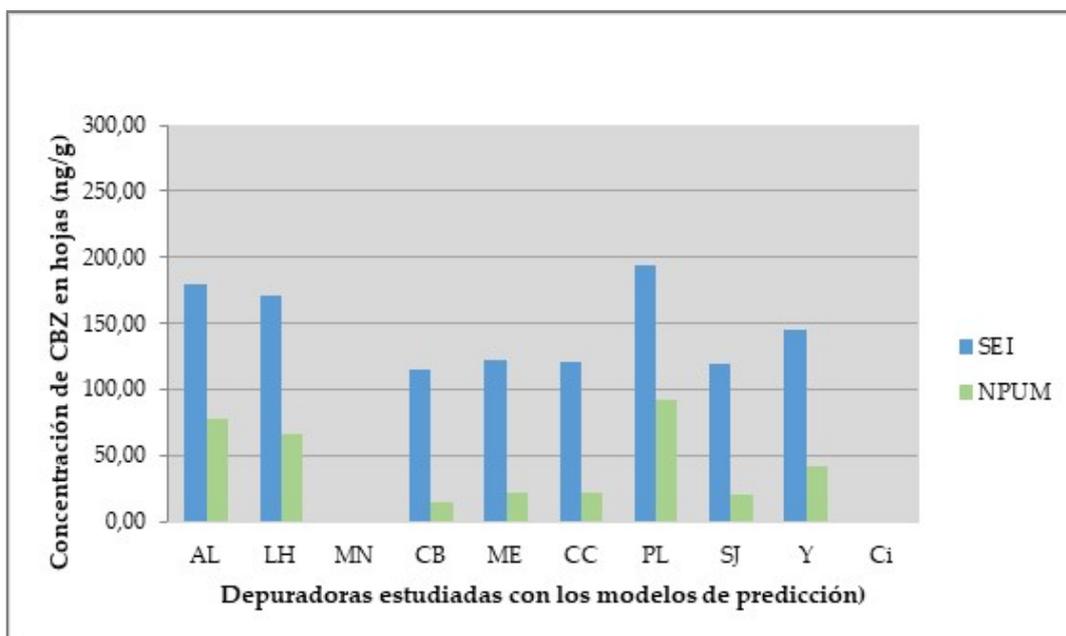


Figura 85. Gráfica comparativa de la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de CBZ en las hojas de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Analizando casos concretos como en la EDAR de San Javier que con el modelo SEI se predijo una concentración de CBZ en hojas de $119,15 \text{ ng g}^{-1}$ y con el modelo NPUM $19,90 \text{ ng g}^{-1}$. En la predicción de la concentración de CBZ en las raíces de las lechugas, los resultados obtenidos en la predicción son más altos en el modelo SEI que los obtenidos con el modelo NPUM tal y como se puede observar en la siguiente gráfica (Figura 86). En la EDAR de San Javier, se puede ver que la concentración de CBZ en raíces con el modelo SEI fué de $93,21 \text{ ng g}^{-1}$ y con el modelo NPUM $10,30 \text{ ng g}^{-1}$. En las EDAR de Molina y Cieza los valores obtenidos fueron cero en ambos modelos.

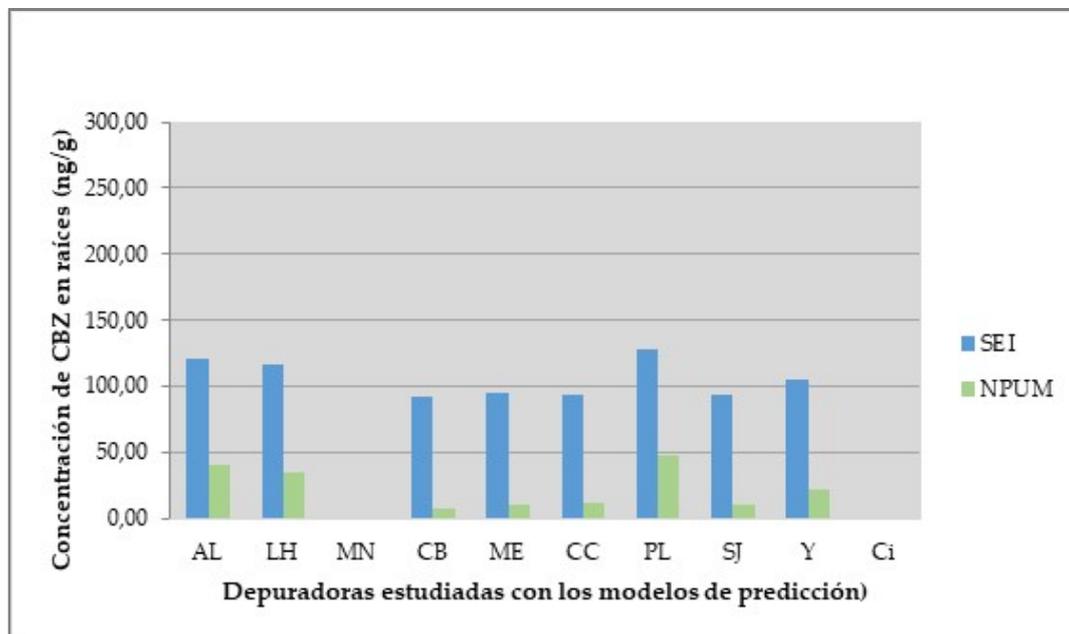


Figura 86. Gráfica comparativa de la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de CBZ en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Los resultados de predicción obtenidos en las hojas en el DCF con el modelo de simulación SEI fueron igual a cero y en todas las EDAR y los obtenidos con el modelo de simulación NPUM también fueron igual a cero.

En la predicción obtenida con los dos modelos en la concentración de DCF en las raíces los resultados con modelo SEI estuvieron comprendidos entre 25,80 - 26,96 ng g^{-1} , mientras que con el modelo NPUM los valores en casi todas las EDAR fueron cero exceptuando en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya y Murcia Este que estuvieron comprendidos entre 0,77 - 1,13 ng g^{-1} tal y como se puede observar en la siguiente gráfica (Figura 87).

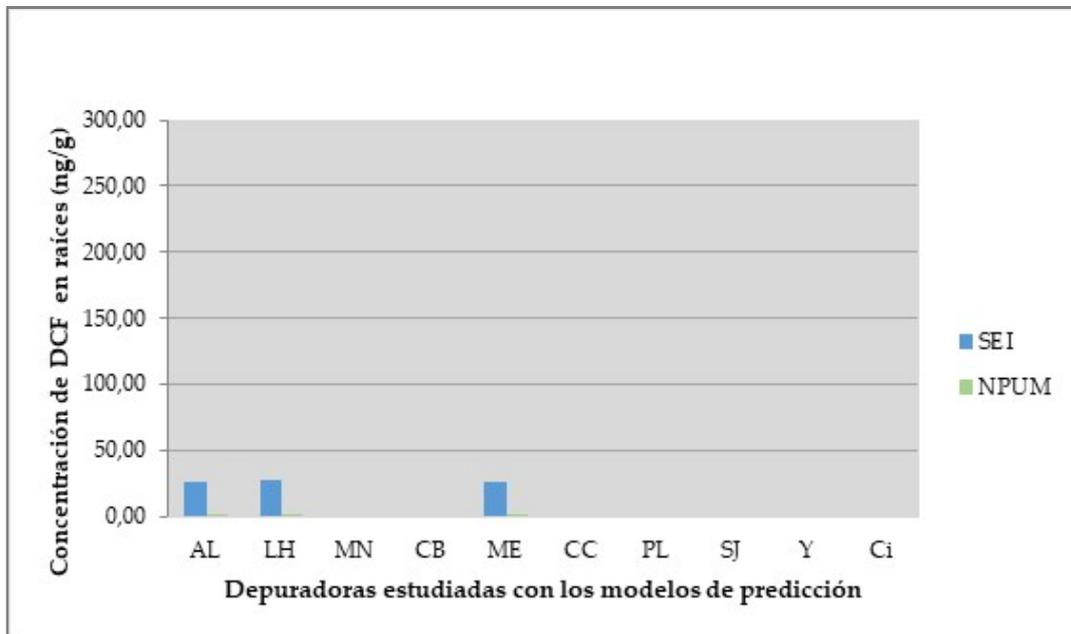


Figura 87. Gráfica comparativa de la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de DCF en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

6.2.4.2. Comparativa entre los Factores de Bioconcentración (BCF) basados en los resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF realizados en los modelos de simulación SEI y NPUM

Se ha realizado la comparativa del Factor de Bioconcentración (BCF) (Fórmula 23) en los dos modelos de simulación para analizar como influyen las diferencias en las predicciones de los modelos en el cálculo del BCF y en su interpretación. para estudiar la capacidad que tiene el CE de acumularse en el tejido vegetal de las lechugas (hojas y raíces) después de su absorción en el caso que fueran regadas con el efluente de las EDAR estudiadas. En las siguientes gráficas (Figuras 88 - 90) tenemos los Factores de Bioconcentración en hojas y raíces de la CBZ y en raíces de DCF (no se calculó el BCF para las hojas del DCF debido a que los resultados de predicción obtenidos en las hojas en el DCF con los dos modelos de simulación fueron igual a cero).

Comparando los BCFs en las hojas de la CBZ (Figura 88), se puede observar que con el modelo SEI se calcularon unos valores comprendidos entre 6,13 y 3,80 mientras que con el modelo NPUM los valores oscilaron entre entre 0,78 y 0,66.

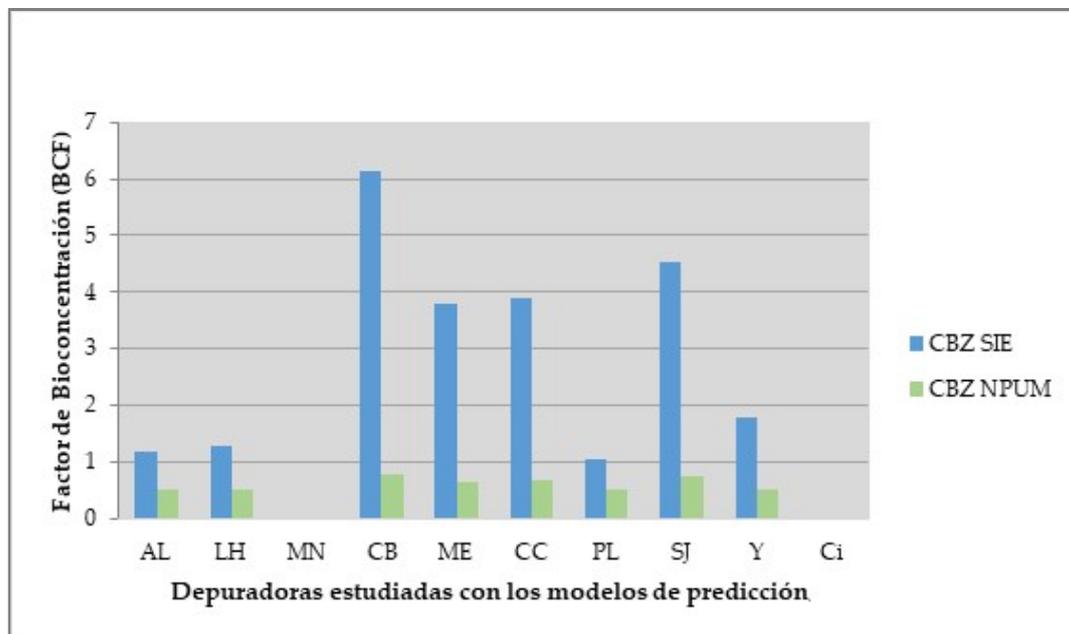


Figura 88. Gráfica comparativa de los BCFs basados en la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de CBZ en las hojas de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

En el cálculo del BCF de las raíces en la CBZ (Figura 89), se obtuvieron en el modelo SEI unos valores comprendidos entre 4,86 y 2,94 en las EDAR y en el modelo NPUM los valores oscilaron entre 0,41 y 0,34. Si nos centramos en los valores de BCF en raíces en el DCF (Figura 90) calculados con el modelo de simulación SEI en las EDAR de Murcia Este, Alcantarilla y La Hoya obtuvieron unos valores comprendidos entre 5,39 y 3,91, mientras que los valores calculados con el modelo de simulación NPUM en las mismas EDAR oscilaron entre 0,23 y 0,14. Por último, en el cálculo del BCF de las raíces en la DCF, los valores fueron igual a cero en el modelo SEI porque la predicción en raíces fue cero y en el modelo NPUM los valores obtenidos fueron 0,15, 0,14 y 0,23 en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya y Murcia Este.

Interpretando estos valores calculados con los resultados de predicción, los CEs tienen mayor capacidad de acumularse en las hojas de las lechugas con las predicciones obtenidas en el modelo SEI que con los resultados obtenidos con el modelo de predicción NPUM. Además, con el modelo NPUM se calcularon valores de BCF en las raíces del DCF que fueron igual a cero en el modelo SEI.

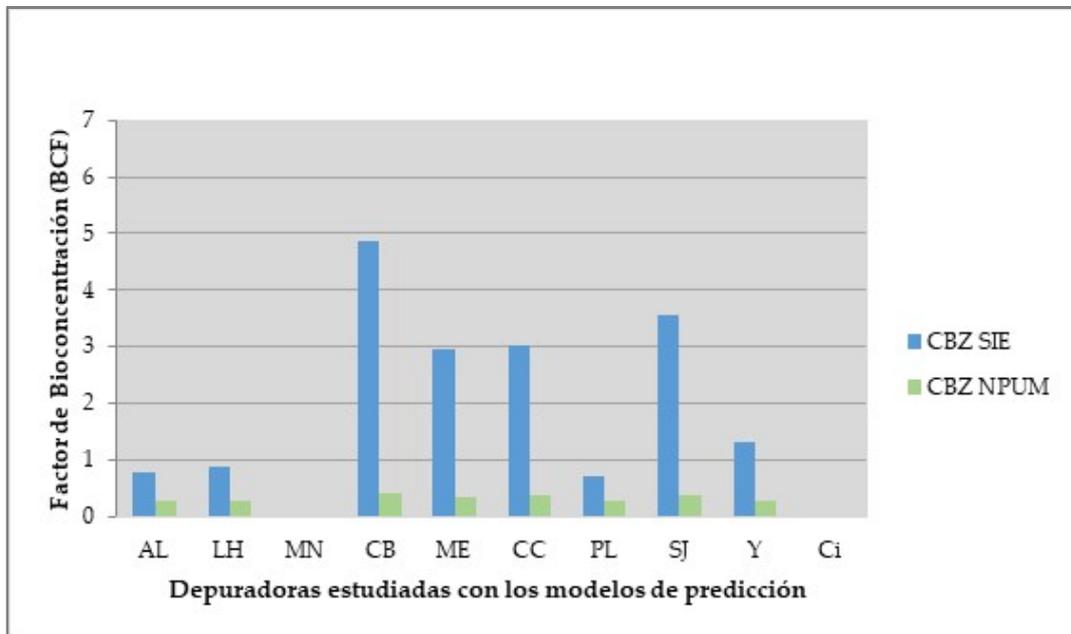


Figura 89. Gráfica comparativa de los BCFs basados en la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de CBZ en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

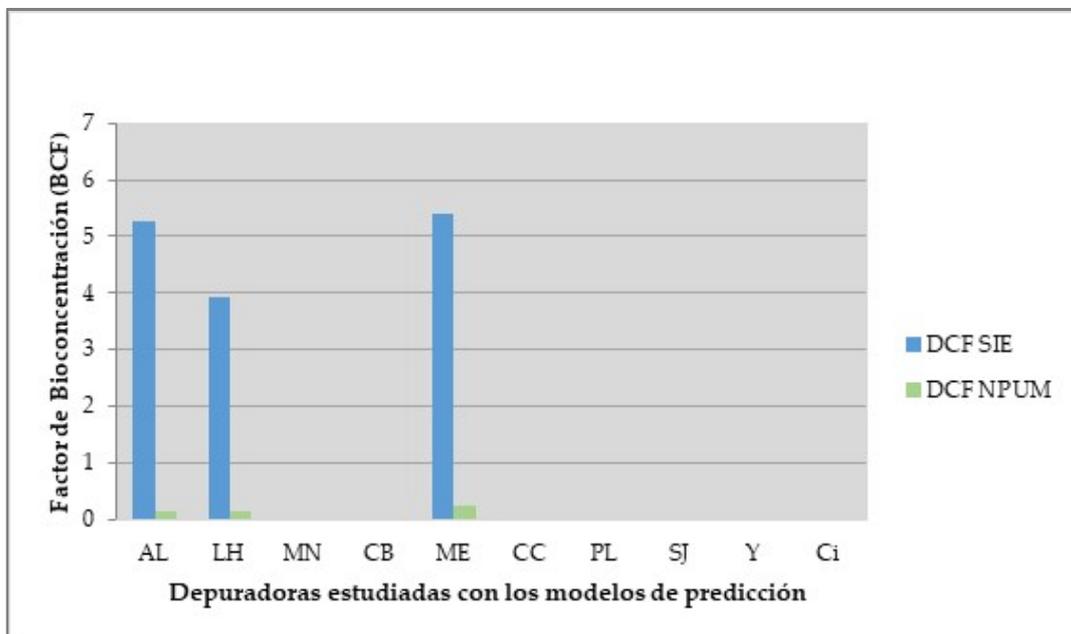


Figura 90. Gráfica comparativa de los BCFs basados en la predicción realizada con los dos modelos de la concentración de DCF en las raíces de las lechugas regadas con el efluente de las EDAR de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

6.2.4.3. *Comparativa entre la relación de la concentración Hoja/Raíz (Choja/Craíz) basados en los resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF realizados con los modelos de simulación SEI y NPUM*

Se ha comparado, la relación de concentración hoja / raíz ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) (Fórmula 24) para evaluar el potencial de translocación de los dos CE estudiados a las raíces y hojas de las lechugas con los datos obtenidos según las predicciones del SEI y NPUM en el cultivo de lechuga en las 8 de las 10 EDAR distribuidas por la Región de Murcia. Como se puede observar en la siguiente gráfica (Figura 91), los resultados obtenidos en la relación de concentración hoja / raíz ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) de CBZ con el modelo NPUM son cercanos a 2 en 8 de las 10 EDAR estudiadas (En concreto en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya, Cabezo Beaza, Murcia Este, Caravaca, Puerto Lumbreras, San Javier y Yecla). En las EDAR de Molina y Cieza el resultado ha sido cero. Los resultados obtenidos con el SEI en la relación de concentración hoja / raíz ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) han sido en todas las EDAR comprendidas entre 1 - 1,5.

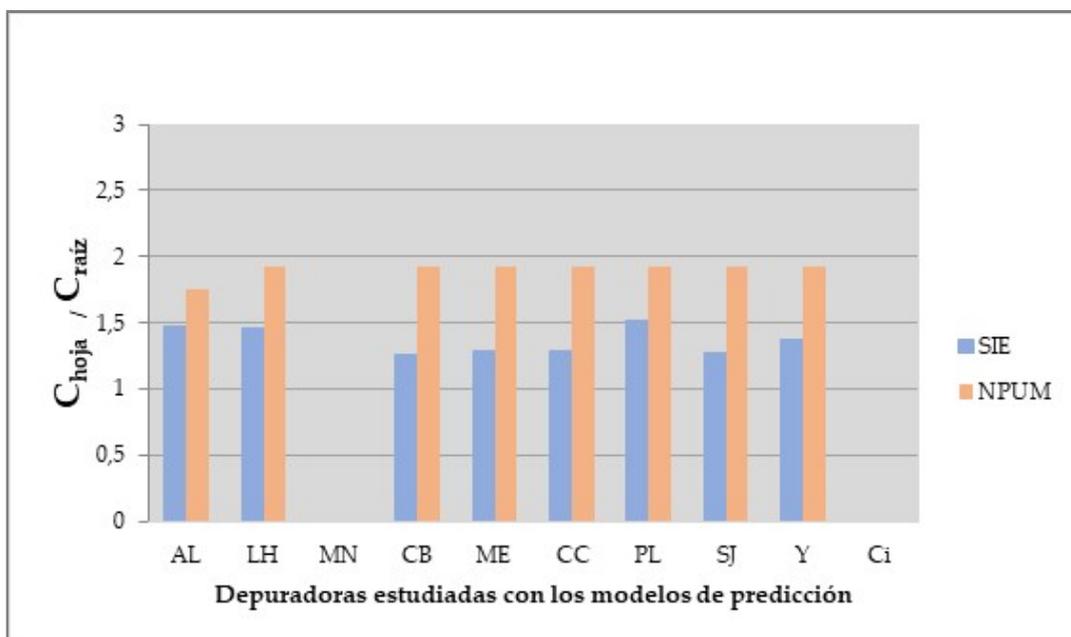


Figura 91. Gráfica comparativa de las relaciones de concentración de hoja / raíz en CBZ ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) obtenidas con los resultados de los dos modelos de predicción en las EDAR estudiadas de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

La relación de concentración hoja / raíz ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) calculadas en las lechugas regadas con el efluente de las EDAR, fueron más homogéneos en el modelo NPUM que con el modelo SEI. En el caso del DCF, los cálculos en los dos modelos de predicción de la $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ tienen un valor igual a 0 en todas las EDAR.

Analizando y comparando los resultados de las relaciones $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ en los dos modelos de predicción planteados, en los dos casos nos indica una buena translocación de la CBZ de la raíz a la hoja. Por el contrario, en el caso del DCF, según los dos modelos de predicción planteados las relaciones $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ mostraron valores igual a 0 en todas las EDAR. Este resultado es consecuencia de la predicción de la concentración de DCF en las hojas y raíces de la lechuga teniendo en cuenta la hipótesis que son regadas con el agua del efluente de dichas EDAR. Al tener estas EDAR una concentración baja de DCF en el efluente y al tener este CE un comportamiento de la translocación limitada, la translocación de las raíces a las hojas se considera un proceso pasivo y por este motivo las relaciones $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ mostraron valores igual a 0 en todos los casos.

6.2.4.4. Comparativa entre el cálculo del riesgo de consumo de lechugas regadas con agua procedente de EDAR para la salud humana basados en los resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF realizados con los modelos de simulación SEI y NPUM

Con los resultados obtenidos en los dos modelos de predicción se realizó una comparativa del cálculo de riesgo humano en el consumo de lechugas por ingesta de CBZ y DCF (Figuras 92 y 93).

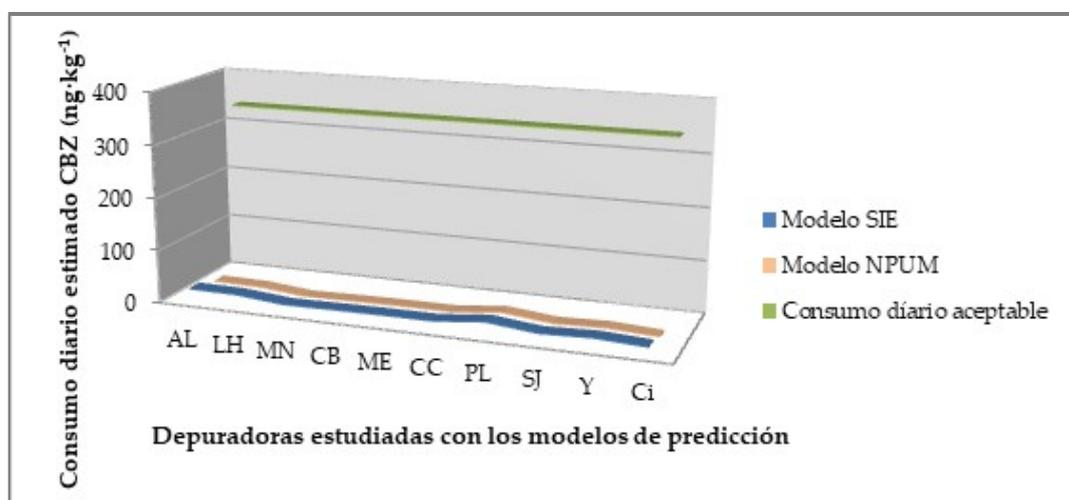


Figura 92. Gráfica comparativa del consumo diario estimado en hojas de CBZ obtenidas con los resultados de los dos modelos de predicción en las EDAR estudiadas de la Región de Murcia y el consumo diario aceptable. Fuente: elaboración propia

En las hojas, el consumo diario de CBZ (Figura 92) ingerido por día mostró unos valores de 24,07 y 15,46 ng·kg⁻¹ en las EDAR de Alcantarilla y Cabezo Beaza con el modelo de simulación SEI, mientras que para esas mismas EDAR los valores fueron de 10,33 y 1,96 ng·kg⁻¹ respectivamente con el modelo de simulación NPUM., muy por debajo del consumo diario aceptable de CBZ con un valor de 340,00 ng·kg⁻¹·d⁻¹. En el DCF (Figura 93), el consumo diario de DCF fue igual a cero con el modelo de simulación SEI al no detectar ningún valor en las hojas de las lechugas y con el modelo de simulación NPUM el valor fue prácticamente cero (0,01 ng·kg⁻¹) cuando el consumo diario aceptable de DCF tiene un valor de 67.000,00 ng·kg⁻¹·d⁻¹.

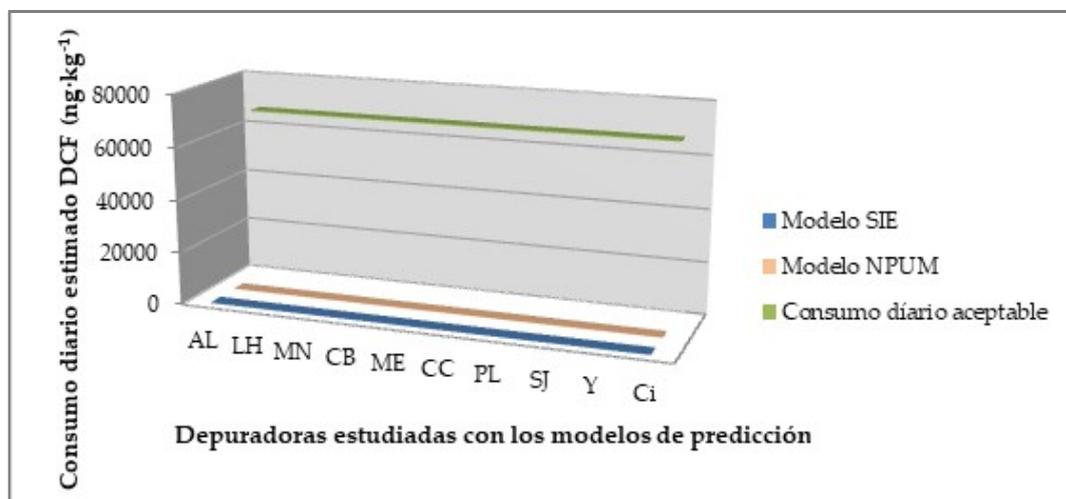


Figura 93. Gráfica comparativa del consumo diario estimado en raíces de DCF obtenidas con los resultados de los dos modelos de predicción en las EDAR estudiadas de la Región de Murcia y el consumo diario aceptable. Fuente: elaboración propia

Teniendo en cuenta estos cálculos, se puede observar que las cantidades estimadas de CBZ y DCF ingeridas por día, que están muy por debajo de los límites aceptables si se consumieran las lechugas en la hipótesis que se regaran con los efluentes de las EDAR estudiadas en los valores obtenidos en los dos modelos de simulación.

6.2.4.5. Análisis comparativo de los resultados obtenidos en los dos modelos de predicción estudiados

Según los resultados obtenidos y expuestos anteriormente se encuentran diferencias entre los dos modelos de predicción valorados. Estos dos modelos de predicción se calibraron tomando como referencia los resultados obtenidos en el segundo experimento realizado en lechugas, las cuales se regaron con una mezcla de CBZ y DCF a diferentes concentraciones (0, 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$) con el objetivo de predecir la acumulación de CBZ y DCF en las hojas y raíces de las lechugas sin necesidad de repetir los experimentos. El modelo SEI no tiene en cuenta ningún parámetro que pueda influir en la absorción de los CE en las hojas y raíces de las lechugas y la forma de calibrarlo fue alimentando una red neuronal con los datos obtenidos de la concentración de CE en las lechugas en el segundo experimento y enseñarle como se comportaría con los resultados obtenidos con la concentración de agua del agua de riego a la que estarían expuestas esas

lechugas. A partir de estos valores, el modelo de predicción es capaz reproducir y obtener unos resultados de absorción en lechugas en los CEs en los que se le ha ido “entrenando”.

En el modelo de simulación NPUM necesitamos introducir los valores de las propiedades fisicoquímicas de los CEs y los parámetros propios del cultivo que estamos estudiando, necesarios para predecir la concentración de CEs en los tejidos de las lechugas. La diferencia de este modelo respecto al anterior es que podemos controlar en todo momento cualquier cambio o modificación en las condiciones de los cultivos tales como la transpiración, el índice de crecimiento de hojas y raíces, el tiempo hasta la recolección y qué está sometido al riego con CEs, así como también el pH del suelo o sustrato donde está el cultivo en cuestión. Esto permite calibrar y personalizar en todo momento los experimentos que pueden ser llevados a cabo, para obtener unos resultados teniendo en cuenta un mayor número de parámetros que en el anterior modelo que influyen en la absorción de CEs en los cultivos.

6.2.5. Predicción de absorción de IBP, KTP y NPX mezclada con el agua de riego a diferentes concentraciones realizados con el modelo de simulación NPUM

Una vez calibrado el modelo de simulación NPUM, se realizó una predicción para poder obtener la acumulación de IBP, KTP y NPX en los tejidos de las lechugas si fueran cultivadas mezclando en el agua de riego estos CE's a diferentes concentraciones (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$) (Figura 94).

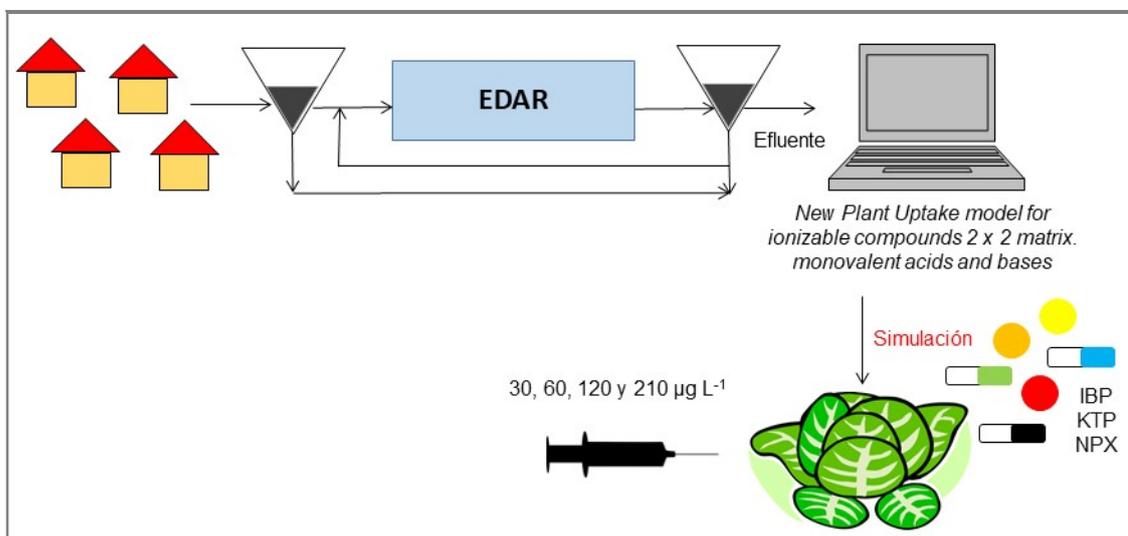


Figura 94. Predicción de absorción de IBP, KTP y NPX en lechugas con el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

La predicción de acumulación de IBP, KTP y NPX se realizó para las tres variedades de lechuga (Lechuga Iceberg var. Gitana, Lechuga Mini Romana var. Jabera y Lechuga Hoja de Roble var. Kiprien) y así poder analizar la tendencia de acumulación de estos CE's en hojas y raíces de las lechugas y que variedad acumuló mayor concentración de CE's.

6.2.5.1. Predicción de IBP, KTP y NPX en los tejidos vegetales de las lechugas

Con el modelo de simulación se realizó una predicción de restos CE en los tejidos vegetales (hojas y raíces) de las lechugas. En las siguientes gráficas (Figuras 95 a 100) se pueden observar los resultados de predicción de concentración de IBP, KTP y NPX en las hojas y raíces de las tres variedades de lechuga. Las concentraciones detectadas en los tejidos vegetales (hojas y raíces) respondieron a las diferentes concentraciones a los que estuvieron expuestas las lechugas en el agua de riego utilizada con concentraciones de CBZ mezclados a 30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$.

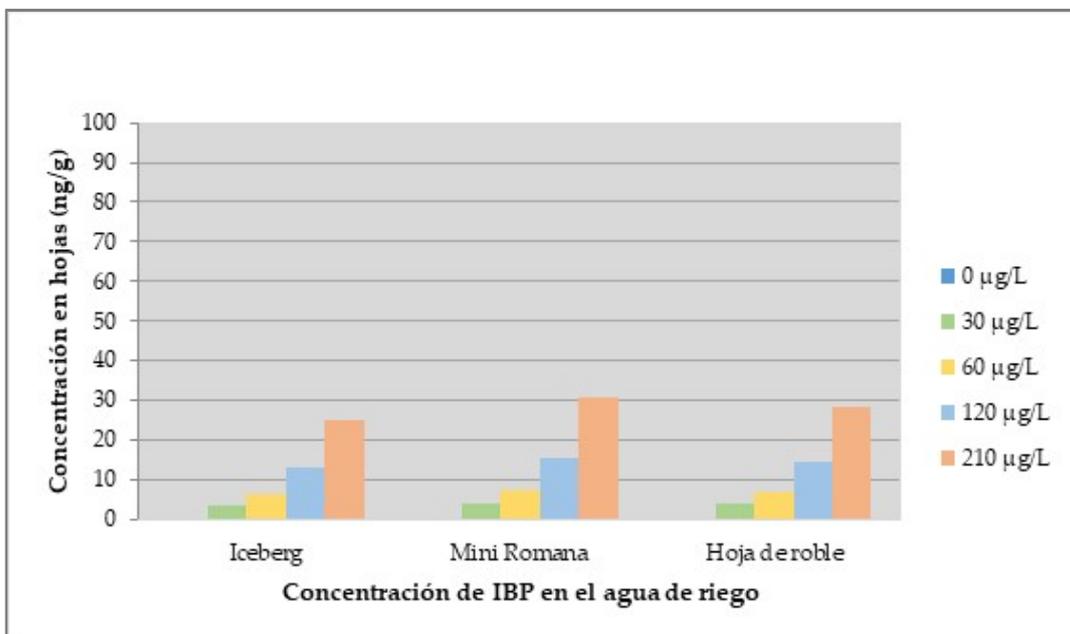


Figura 95. Gráfica comparativa de la concentración de IBP en las hojas de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

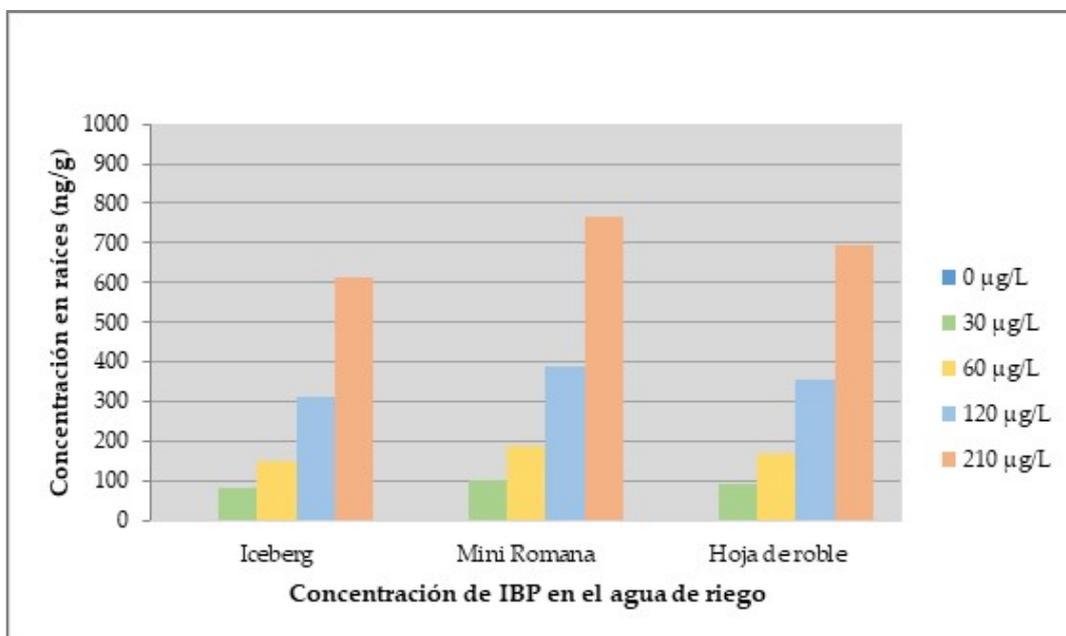


Figura 96. Gráfica comparativa de la concentración de IBP en las raíces de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

Tal y como se puede observar en las gráficas anteriores, en la simulación realizada con IBP en las tres variedades de lechuga, los resultados mostraron concentraciones más altas en las hojas que en las raíces (Figuras 95 y 96). Si nos centramos en las hojas de las tres variedades de lechuga, fueron las hojas de la variedad Mini Romana donde se encontraron las concentraciones más altas de IBP, mientras que en las otras dos variedades de lechuga (Iceberg y Hoja de Roble) se encontraron con concentraciones ligeramente inferiores de IBP.

Con respecto a las raíces, dentro de las tres variedades, fueron también las raíces de la variedad Mini Romana donde se encontraron concentraciones ligeramente más altas de la IBP que en las otras dos variedades de lechuga. Este comportamiento característico de la CBZ, en el que tiende a acumularse en mayor concentración en las hojas que en las raíces, se debe a las propiedades fisicoquímicas del IBP. Estos resultados de predicción están respaldados por otras publicaciones, como en experimentos realizados en lechuga que se regaron con agua mezclada a diferentes concentraciones de IBP (4, 10, 20 y 40 µg L⁻¹) y se obtuvieron valores más altos de IBP en raíces que hojas (Hurtado et al., 2016).

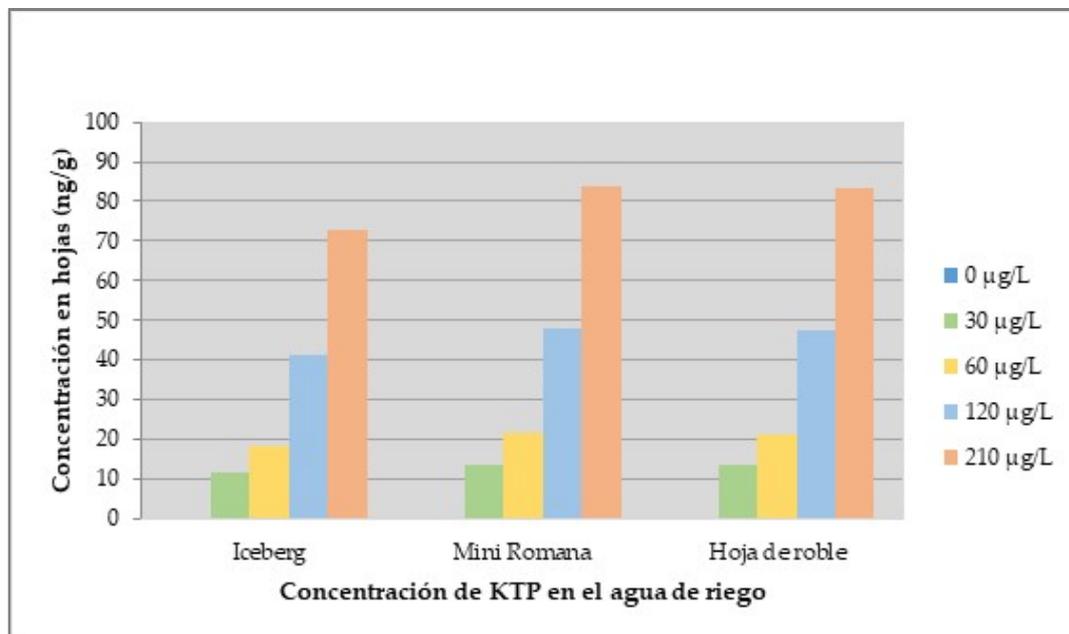


Figura 97. Gráfica comparativa de la concentración de KTP en las hojas de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

En la predicción realizada con el KTP, la concentración de DCF detectada en las tres variedades de lechuga, fue mayor en las raíces que en las hojas (Figuras. 97 y 98), lo que sugiere que el KTP fue absorbido por las raíces y luego transportado a las hojas en un proceso de translocación relativamente lento. Dentro de las tres variedades de lechuga, la variedad Mini Romana acumuló la mayor cantidad de KTP tanto en raíces como en hojas. Esta mayor tendencia de acumulación del KTP en raíces que en hojas ha sido documentado en otros estudios realizados como el llevado a cabo en guisantes (Tanoue et al., 2012) en el que a una concentración de KTP mezclada en agua de $250 \mu\text{g L}^{-1}$ se obtuvieron unos resultados de $15,70 \text{ ng g}^{-1}$ y $32,20 \text{ ng g}^{-1}$ en hojas y raíces respectivamente y a una concentración de de KTP mezclada en agua de $1.000 \mu\text{g L}^{-1}$ los resultados fueron de $47,80 \text{ ng g}^{-1}$ y $94,70 \text{ ng g}^{-1}$ en hojas y raíces respectivamente.

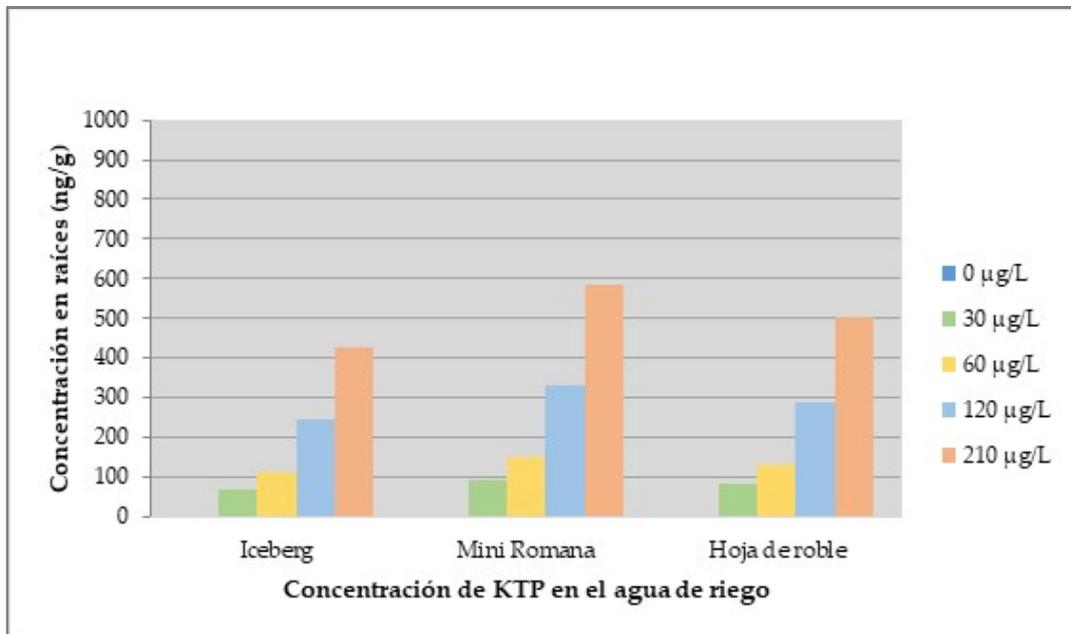


Figura 98. Gráfica comparativa de la concentración de KTP en las raíces de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

Por último, en la simulación realizada con el NPX a diferentes concentraciones, los resultados mostraron mayor tendencia de acumulación en raíces que en hojas confirmando la mayor acumulación del NPX en la variedad Mini Romana. Experimentos realizados en otros estudios confirman estos resultados de simulación como los realizados en lechugas y coles (Dodgen et al., 2013) donde para una concentración de NPX de $0,1782 \mu\text{g L}^{-1}$ se obtuvieron unos resultados de $3,15$ y $330,00 \mu\text{g g}^{-1}$ en hojas y raíces de lechugas respectivamente y de $4,50$ y $71,10 \mu\text{g g}^{-1}$ en hojas y raíces de las coles respectivamente. De los tres CEs estudiados, en el NPX se predijo una acumulación en mayor proporción en las raíces que en las hojas con una concentración de $2126,60 \mu\text{g g}^{-1}$ en raíces y $64,50 \mu\text{g g}^{-1}$ en hojas.

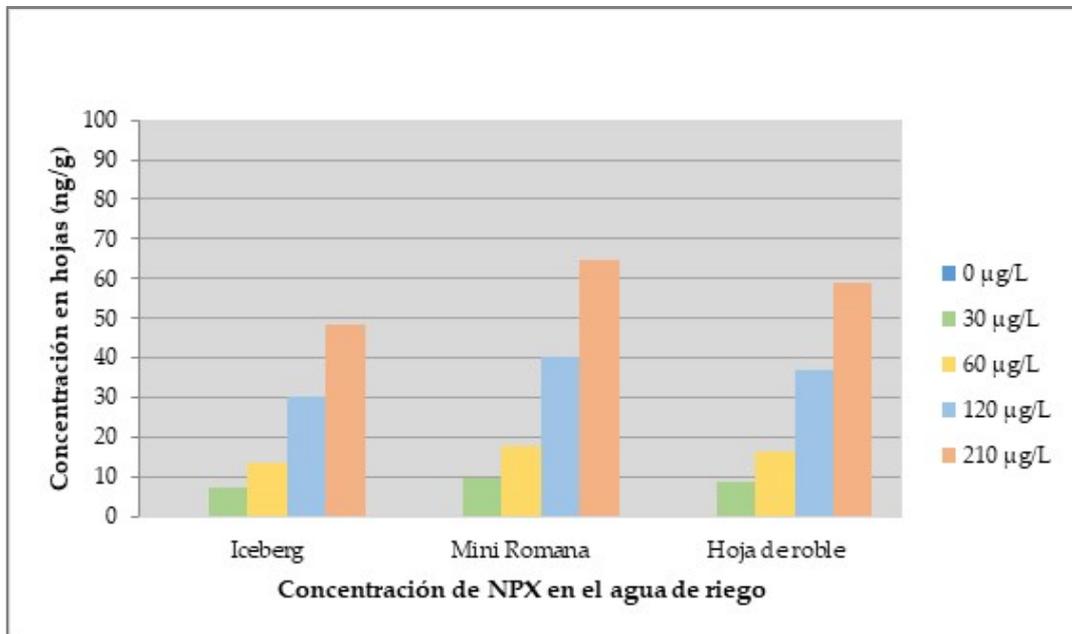


Figura 99. Gráfica comparativa de la concentración de NPX en las hojas de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

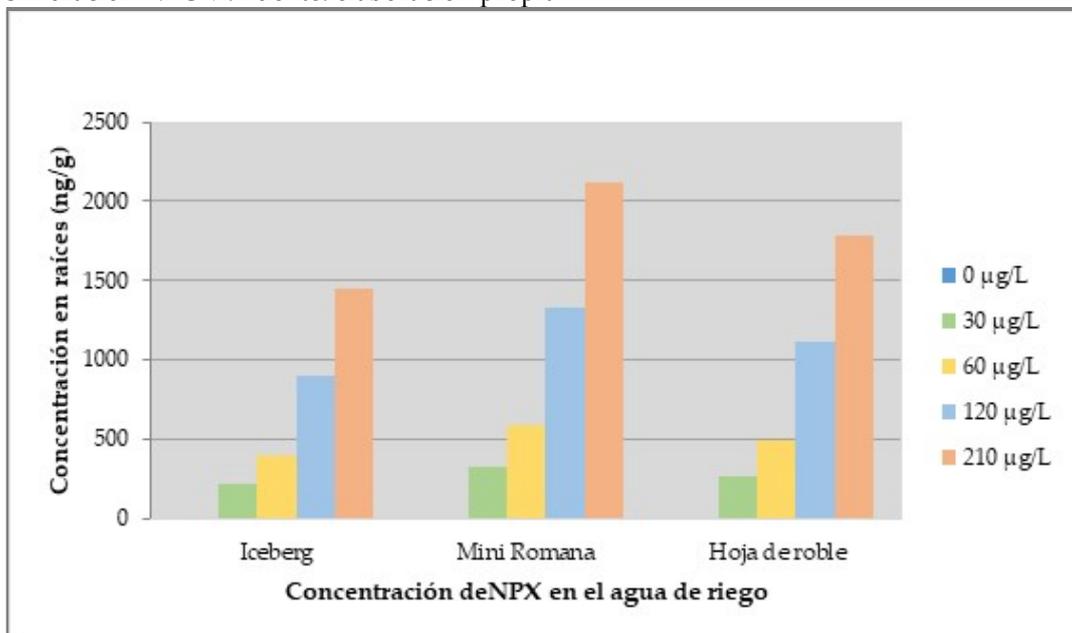


Figura 100. Gráfica comparativa de la concentración de NPX en las raíces de las tres variedades de lechuga de los valores obtenidos en la predicción con el modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

Esta mayor tendencia de acumulación de IBP, KTP y NPX en raíces que en hojas es importante en aquellos cultivos donde el aprovechamiento es de la parte subterránea. En este caso las mayores concentraciones de IBP, KTP y NPX detectadas en las raíces no son relevantes porque las raíces de la lechuga no se consumen.

6.2.5.2. Cálculo del Factor de Bioconcentración

Se calculó un BCF (Fórmula 23) para cada concentración de IBP, KTP y NPX mezclado con el agua (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g/L}$) y poder observar la respuesta en cada tramo estudiado. Valores más altos de BCF indican que el CE tiene mayor tendencia a acumularse en una parte del tejido vegetal que en otro, por el contrario, unos valores bajos de BCF indican una menor tendencia del CE a acumularse en esa parte del tejido vegetal. Para corroborar esta tendencia, se calcularon los BCFs con los valores que obtenidos en la predicción de IBP, KTP y NPX en hojas y raíces de la lechuga de la variedad Mini Romana al ser la variedad que resultó en la predicción con valores más altos de absorción de CEs.

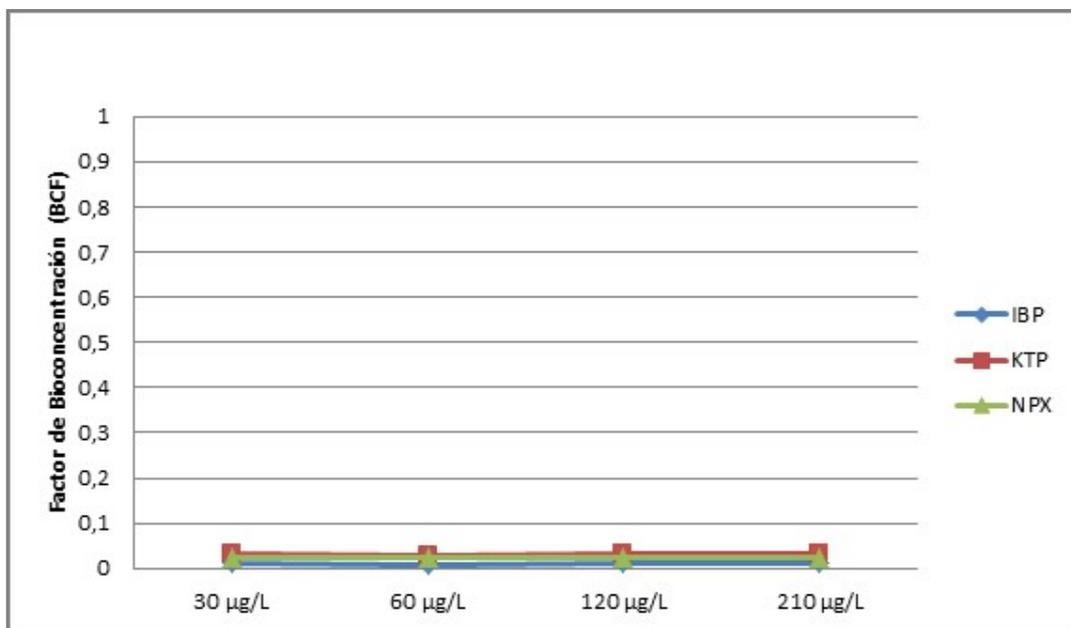


Figura 101. Factor de bioconcentración de IBP, KTP y NPX en hojas. Fuente: elaboración propia

Los resultados de los cálculos de BCF en hojas mostraron valores cercanos a cero en todas las concentraciones de IBP, KTP y NPX estudiadas (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g/L}$) (Figura 101). Con respecto a los valores de BCF de la IBP, KTP y NPX en las raíces, los valores más altos se mostraron en el NPX con unos valores medios de 0,80 (en todas las concentraciones estudiadas) mientras el IBP y KTP mostraron valores más bajos de BCFs con unos valores comprendidos entre 0,28 y 0,24 en IBP y de 0,24 y 0,19 en KTP (Figura 102). Este valor más alto de BCF en el caso del NPX confirma una tendencia muy marcada de acumulación de NPX en las raíces.

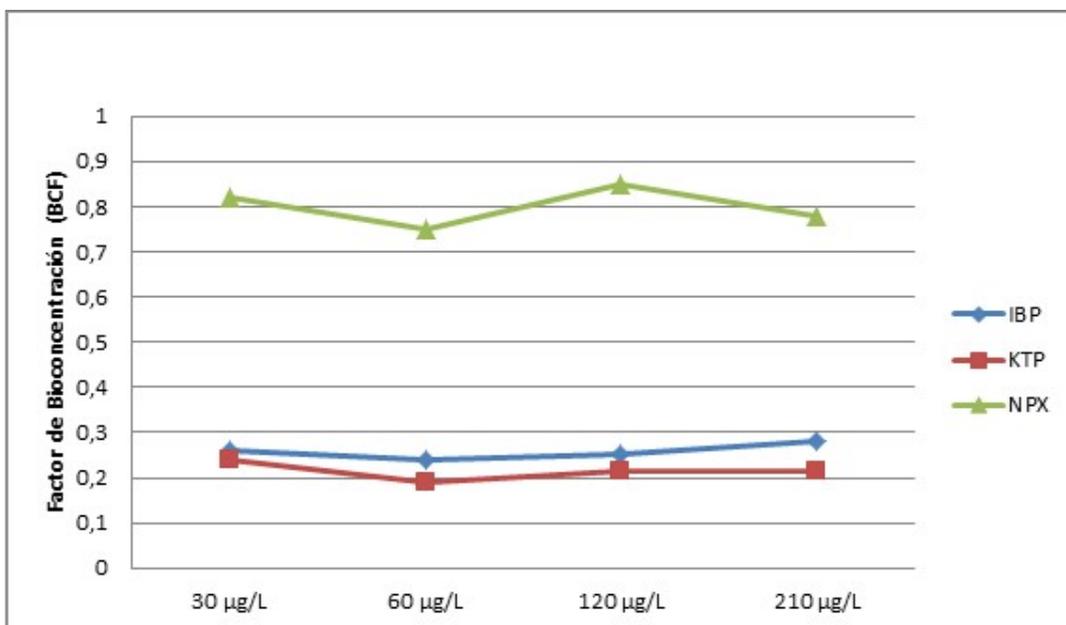


Figura 102. Factor de bioconcentración de IBP, KTP y NPX en raíces. Fuente: elaboración propia

6.2.5.3. Relación de la concentración Hoja/Raíz ($C_{\text{hoja}}/C_{\text{raíz}}$)

La relación de concentración hoja / raíz ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) se calculó (Fórmula 24) para evaluar el potencial de translocación de IBP, KTP y NPX estudiados a las raíces y hojas de la lechuga de la variedad Mini Romana. Al igual que el BCF calculado en el apartado anterior, la $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ es otra forma de calcular la tendencia de los CE a acumularse en la parte aérea o en las raíces de las plantas estudiadas. Se calcularon cada valor de $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ según los valores obtenidos en la predicción de acumulación de hojas y raíces en cada

concentración de CE mezclada en el agua de riego (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g/L}$). Unos valores altos (mayor de 1) de esta relación de concentración muestran que el comportamiento los CEs tienden a acumularse en las los tallos y hojas de los cultivos estudiados. Unos valores bajos de la relación de concentración indican una mayor tendencia de los CEs estudiados a ser retenidos y acumulados en las raíces.

Como se puede observar en la siguiente gráfica (Figura 103), la relación $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ resultó cercana a cero en la predicción de las concentraciones de IBP, KTP y NPX estudiadas en el agua de riego (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g/L}$). El comportamiento de la translocación limitada de estos CEs es explicado debido a un proceso pasivo que depende de las propiedades fisicoquímicas del producto químico (Simonich y Hites, 1995).

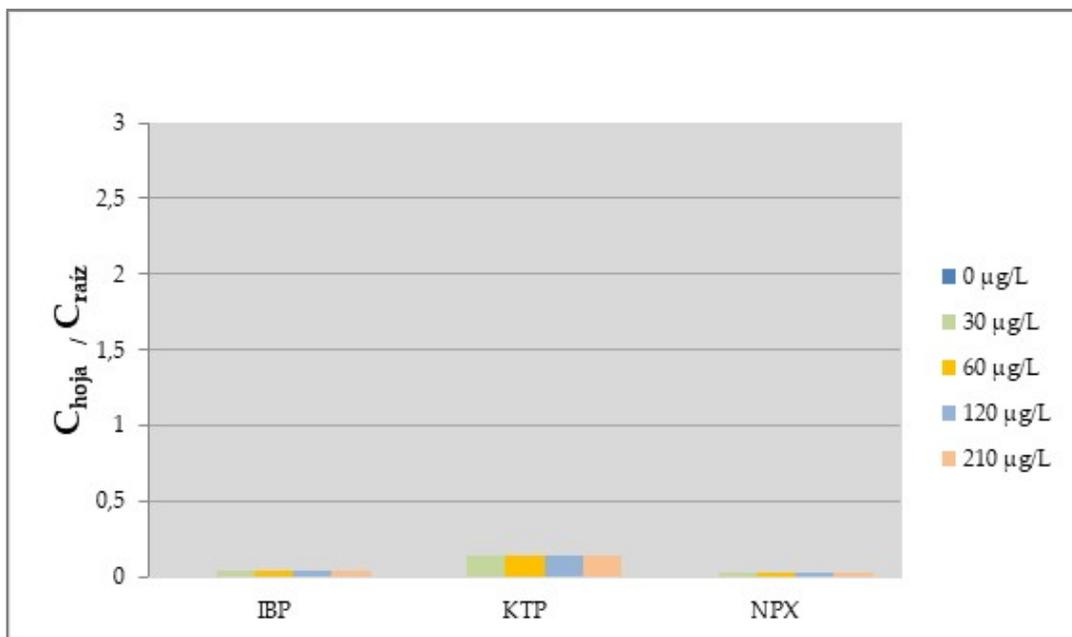


Figura 103. Relaciones de concentración de hoja / raíz en IBP, KTP y NPX ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$). Fuente: elaboración propia

6.2.5.4. Cálculo del riesgo de consumo de lechugas regadas con agua procedente de EDAR para la salud humana

Se calculó si la acumulación de IBP, KTP y NPX en las partes comestibles de las lechugas constituye un riesgo potencial para la salud humana debido a su incorporación a la cadena alimentaria.

Para realizar esta evaluación, se tuvo en cuenta el peor escenario de exposición a las concentraciones más altas de IBP, KTP y NPX resultantes de la predicción realizada con el modelo de simulación en las hojas y raíces de la lechuga de la variedad Mini Romana correspondientes a la respuesta con las dosis de CE's más altas mezcladas en el agua de riego (210 µg/L).

Se realizó el cálculo siguiendo el método descrito en Hyland et al. (2015), en el cual la ingesta diaria humana de cada medicamento para cada variedad de lechuga se estimó multiplicando la concentración calculada para la porción comestible (ng g^{-1}) por el consumo medio de lechuga es de 7,0 g d^{-1} para un individuo de 70 kg (National Center for Environmental Assessment, 2011); 8,3 g d^{-1} en la población belga de más de 15 años (Temme et al., 2011) y de 9,00 g d^{-1} para mujeres comprendidas entre 14 y 75 años con un peso corporal de 67,30 kg (Legind y Trapp, 2009). Los cálculos se realizaron para el consumo más elevado según los datos expuestos, es decir, para mujeres consumidoras con un peso corporal de 67,30Kg.

Tomando en consideración las ingestas diarias aceptables para IBP, KTP (Prosser y Sibley, 2015) y NPX (Bruce et al., 2010), que indican la cantidad máxima de CE que una persona puede ingerir por día, los resultados mostraron que las cantidades estimadas de CE ingeridas por día en los tres CE's estuvieron por debajo de los límites que pudiera poner en riesgo a la salud humana. En el caso de la IBP el consumo diario estimado estaba por debajo de los 11,00 $\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ en hojas y raíces, no llegando al límite marcado de los 11.400,00 $\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ del consumo diario aceptable ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$) (Tabla 29). En el KTP, la cantidad diaria estimada ingerida máxima calculada fue de 11,20 $\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ en hojas y 78,15 $\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ en raíces, estando muy por debajo del límite marcado de los 600,00 $\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ del consumo diario aceptable ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$). Por último, en el NPX, la cantidad diaria estimada ingerida máxima calculada fue de 8,62 $\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ en hojas y 283,72 $\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ en raíces, estando muy por debajo del límite marcado de los 570.000,00 $\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$ del consumo diario aceptable ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$).

Tabla 29. Tabla de la ingestión estimada de IBP, KTP y NPX en el consumo de lechuga variedad Mini Romana regada con agua mezclada con CEs a diferentes concentraciones

CE		Concentración en el tejido vegetal (ng·g ⁻¹)	Cantidad diaria de CE consumida en lechuga (ng)	Consumo diario estimado de CE (ng·kg ⁻¹ , mujeres, peso 67,30kg)	Consumo diario aceptable (ng·kg ⁻¹ ·d ⁻¹)
IBP	Hoja	30,60	275,40	4,09	11.400,00 ^a
	Raíz	76,40	687,60	10,21	11.400,00 ^a
KTP	Hoja	83,80	754,20	11,20	600,00 ^a
	Raíz	584,40	5.259,60	78,15	600,00 ^a
NPX	Hoja	64,50	580,50	8,62	570.000,00 ^b
	Raíz	2.121,60	19.094,40	283,72	570.000,00 ^b

^aProsser y Sibley, 2015^bBruce et al., 2010

Tal y como se ha explicado anteriormente y como se puede observar en la tabla anterior, los consumos diarios estimados de los CEs estudiados son muy bajos a las concentraciones estudiadas y no representan ningún riesgo para la salud humana debido a su incorporación a la cadena alimentaria.

6.2.6. Predicción de absorción de KTP y NPX realizados con el modelo de simulación NPUM en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia

Con el modelo de simulación NPUM, se realizó una predicción para obtener la acumulación de KTP y NPX en los tejidos de las lechugas si fueran cultivadas utilizando el efluente de 10 EDAR representativas de la Región de Murcia (Figura 104).

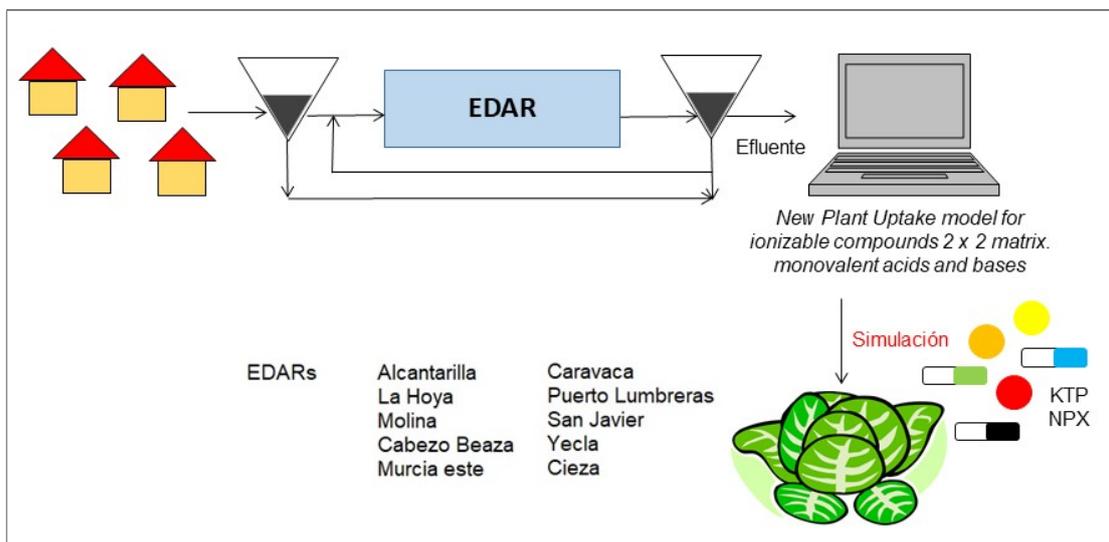


Figura 104. Predicción de acumulación de KTP y NPX en lechugas a partir del modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

Teniendo en cuenta la predicción del apartado anterior en el que la simulación con IBP, KTP y NPX aportó mayor concentración de CE tanto en raíces como en hojas en la variedad Mini Romana, se realizó la simulación de acumulación de KTP y NPX en los tejidos de la lechuga en la variedad Mini Romana si fuera cultivada utilizando el efluente de 10 EDAR representativas de la Región de Murcia.

6.2.6.1. Predicción de KTP y NPX en los tejidos vegetales de las lechugas

Los resultados se muestran en los siguientes mapas de predicción (Figuras 105 - 108) donde se pueden ver las predicciones de concentraciones de KTP y NPX en las 10 EDAR estudiadas de la Región de Murcia.

Como se puede observar en la Figura 105, la simulación de absorción de KTP en las hojas de las lechugas aportó unos valores de KTP en las de EDAR de Alcantarilla, La Hoya, Murcia Este y Caravaca de 0,30, 0,50, 0,10 y 0,10 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ respectivamente.

En el resto de EDAR, el valor obtenido en la predicción es de 0 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$, debido a que la concentración detectada en el efluente de estas EDAR estaba por debajo de los límites de detección ($<0,012\ \mu\text{g}\ \text{L}^{-1}$) y por tanto la concentración de KTP que se tomó en el valor de entrada del modelo de predicción fue igual a cero.

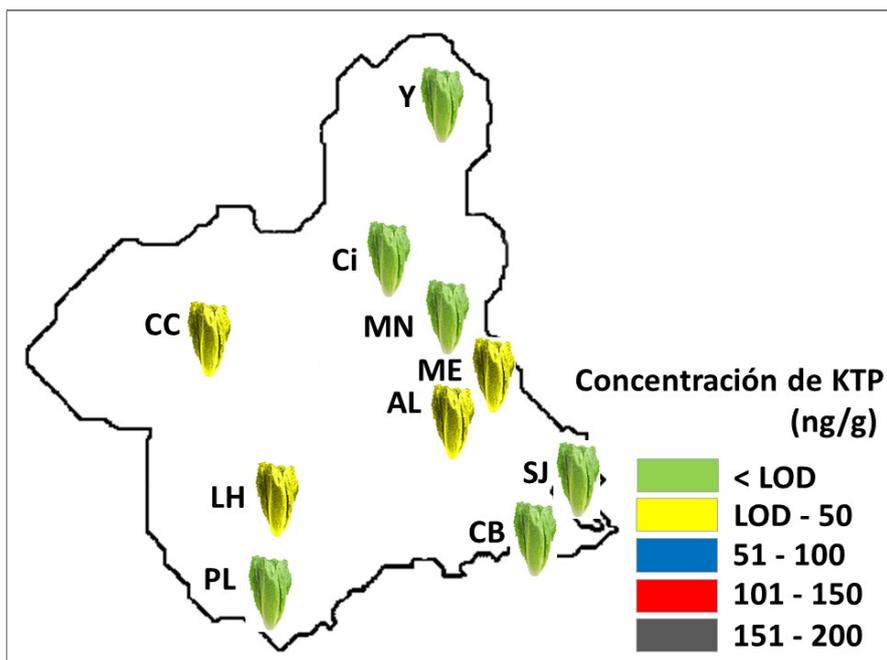


Figura 105. Mapa de predicción de la concentración de KTP en las hojas de las lechugas en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Con respecto a los resultados obtenidos en la predicción de KTP en las raíces (Figura 106), en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya, Murcia Este y Caravaca los valores de predicción aportaron unas concentraciones de 1,90, 3,50, 0,80 y 0,50 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ respectivamente, superiores a las obtenidas en las hojas para esas EDAR. En el resto de EDAR, la concentración detectada en el efluente estaba por debajo de los límites de detección ($<0,012 \mu\text{g L}^{-1}$) y por tanto la concentración de KTP que se tomó en el valor de entrada del modelo de predicción fue igual a cero.

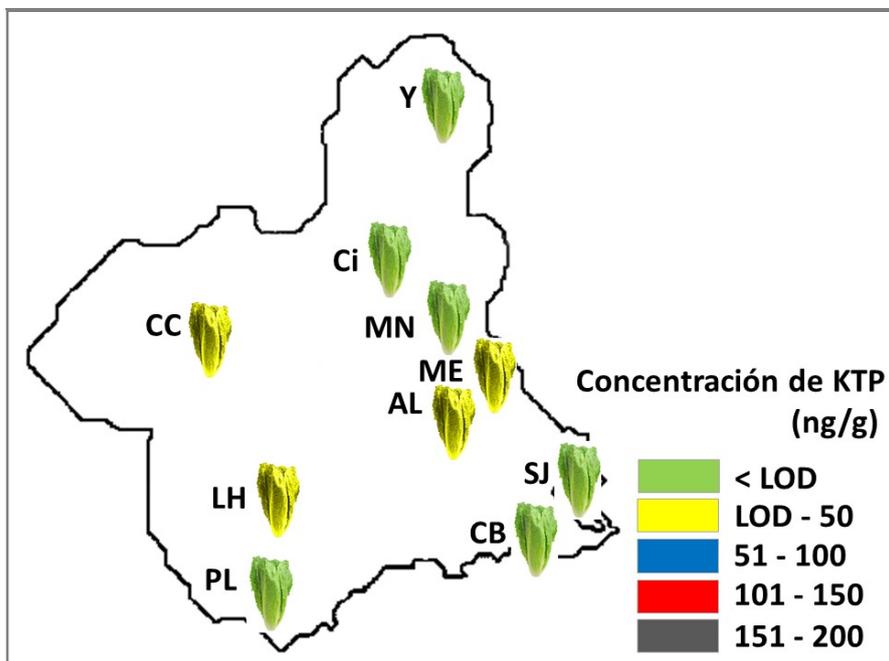


Figura 106. Mapa de predicción de la concentración de KTP en las raíces de las lechugas en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

Analizando los resultados de la concentración de NPX en las hojas de la lechuga que resultó de la predicción con el modelo de simulación, como se puede observar en el siguiente mapa de predicción (Figura 107), el valor obtenido en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya, Cabezo Beaza, Murcia Este y Puerto Lumbreras, resultó unos valores de 0,10, 0,30, 0,30, 0,10 y 1 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ respectivamente. En el resto de EDAR, los valores fueron igual a cero.

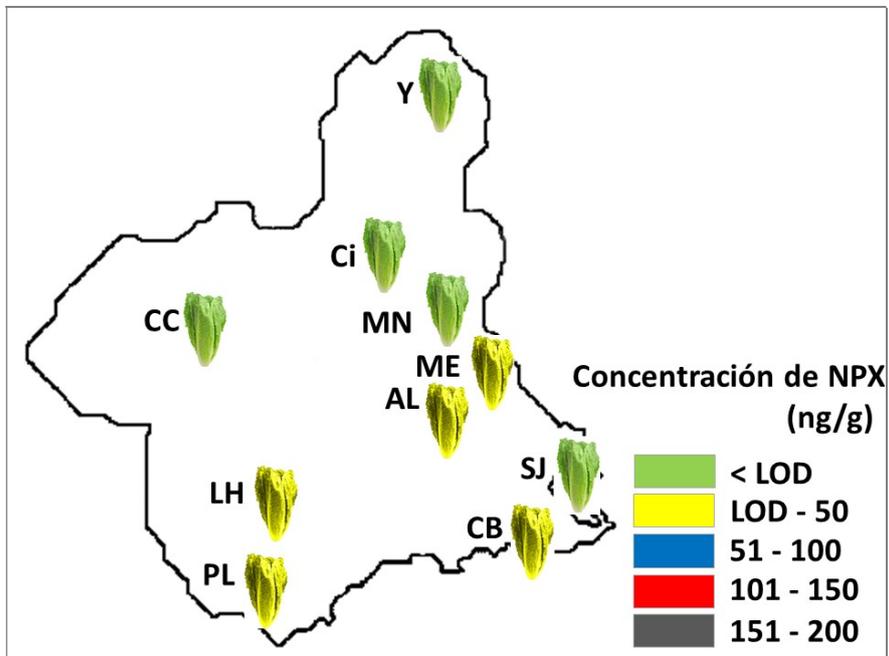


Figura 107. Mapa de predicción de la concentración de NPX en las hojas de las lechugas en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

En los resultados obtenidos de la predicción de acumulación de NPX en las raíces, se obtuvieron valores más altos que en las hojas como se pueden observar en el siguiente mapa de predicción (Figura 108) con unos valores de de 2,50, 8,50, 8,50, 2,40 y 33,90 $\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$ en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya, Cabezo Beaza, Murcia Este y Puerto Lumbreras respectivamente. En el resto de EDAR estudiadas, tal y como se explicó anteriormente el valor fue igual a cero. De los dos CEs analizados, el NPX obtuvo valores más altos de acumulación en raíces que el KTP.

Estos resultados de predicción confirman lo explicado anteriormente respecto a la tendencia de estos dos CEs a su acumulación en hojas y raíces dependiendo de las características físicas químicas de cada uno.

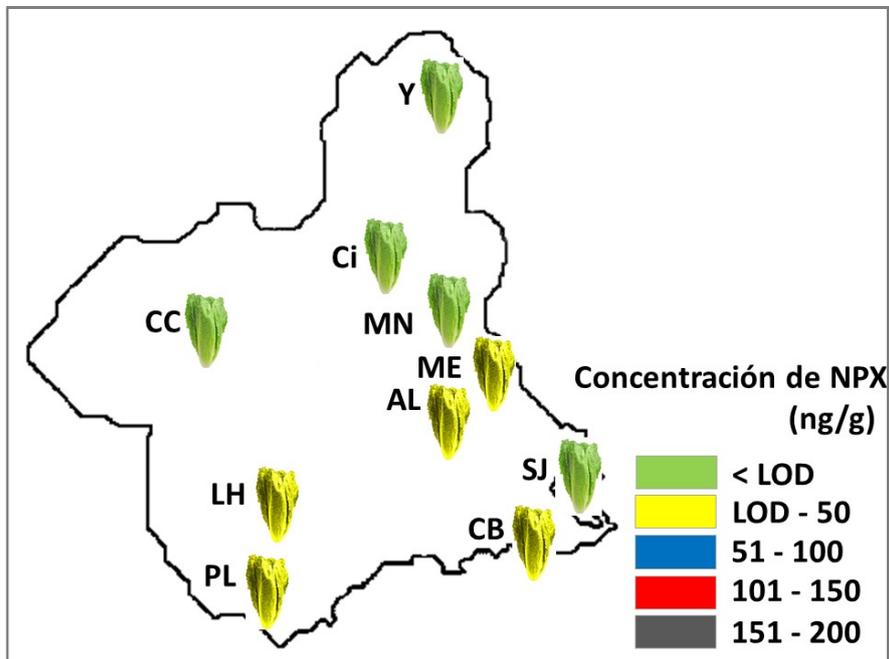


Figura 108. Mapa de predicción de la concentración de NPX en las raíces de las lechugas en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

6.2.6.2. Cálculo del Factor de Bioconcentración (BCF)

Se calculó el Factor de Bioconcentración (BCF) (Fórmula 23) partiendo de las concentraciones predecidas con el modelo de simulación NPUM, en el cultivo de lechuga en la hipótesis que fueran regadas con el efluente procedente de las 10 EDAR distribuidas por la Región de Murcia. Realizando este cálculo podemos apreciar la capacidad que tiene cada CE de acumularse en el tejido vegetal de las lechugas (hojas y raíces) después de su absorción en el caso que fueran regadas con el efluente de las EDAR estudiadas. En la siguiente tabla tenemos los factores de bioconcentración de la KTP y NPX en las hojas en el cultivo de lechuga de las 10 EDAR estudiadas.

Tabla 30. Tabla resumen de BCFs en hojas de KTP y NPX

	KTP BCF (L kg ⁻¹)	NPX BCF (L kg ⁻¹)
Alcantarilla (AL)	0,03	0,03
La Hoya - Lorca (LH)	0,03	0,02
Molina de Segura (MN)	0,00	0,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	0,00	0,02
Murcia Este (ME)	0,02	0,03
Caravaca de la Cruz (CC)	0,06	0,00
Puerto Lumbreras (PL)	0,00	0,02
San Javier (SJ)	0,00	0,00
Yecla (Y)	0,00	0,00
Cieza (Ci)	0,00	0,00

En la siguiente tabla muestra los Factores de Bioconcentración de la KTP y NPX en las raíces en el cultivo de lechuga de las 10 EDAR estudiadas.

Tabla 31. Tabla resumen de BCFs en raíces de KTP y NPX

	KTP BCF (L kg ⁻¹)	NPX BCF (L kg ⁻¹)
Alcantarilla (AL)	0,22	0,69
La Hoya - Lorca (LH)	0,19	0,70
Molina de Segura (MN)	0,00	0,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	0,00	0,65
Murcia Este (ME)	0,18	0,80
Caravaca de la Cruz (CC)	0,32	0,00
Puerto Lumbreras (PL)	0,00	0,70
San Javier (SJ)	0,00	0,00
Yecla (Y)	0,00	0,00
Cieza (Ci)	0,00	0,00

Tal y como se puede ver en las dos tablas (Tabla 30 y 31), en el KTP y NPX los valores de calculados de BCF fueron más altos en las raíces que en las hojas. Los valores obtenidos de BCF del KTP y NPX fueron cercanos a cero en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya, Murcia Este y Caravaca. Por el contrario, en el caso de las raíces se obtuvieron

valores más altos de BCF, que indican que el KTP y NPX tienen mayor tendencia a acumularse en las raíces de las lechugas.

6.2.6.3. Relación de la concentración Hoja/Raíz ($C_{\text{hoja}}/C_{\text{raíz}}$)

Se calculó la relación de concentración hoja / raíz ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) (Fórmula 24) para evaluar el potencial de translocación de los dos CEs estudiados a las raíces y hojas de las lechugas con los datos obtenidos según la predicción del modelo de simulación NPUM en el cultivo de lechuga en las EDAR distribuidas por la Región de Murcia. Como se puede observar en la Figura 109, en el KTP la relación $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ fue menor que 0,20 en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya, Murcia Este y Caravaca excepto en el resto de EDAR que fueron igual a cero. Los valores mostrados en las EDAR fueron muy homogéneos. En el caso del NPX, las relaciones $C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$ mostraron valores cercanos a cero en las EDAR de Alcantarilla, La Hoya, Cabezo Beaza, Murcia Este y Puerto Lumbreras. En el resto de EDAR su valor fue igual a cero. La relación menor que uno, nos indica una translocación limitada del KTP y NPX de la raíz a la hoja y se considera un proceso pasivo que depende de las propiedades fisicoquímicas de cada CE (Simonich y Hites, 1995).

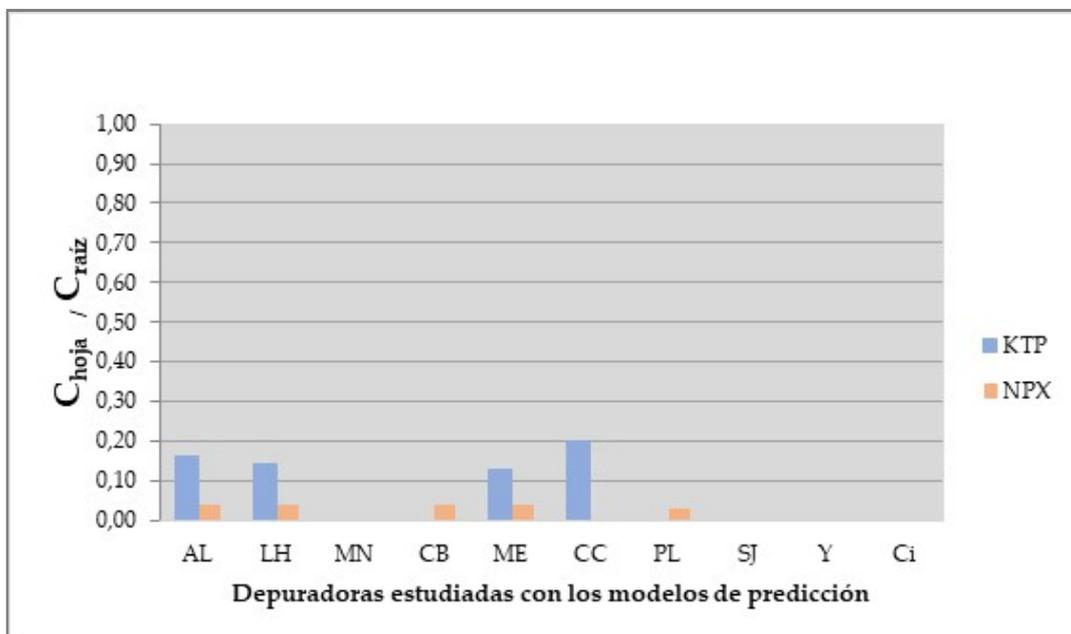


Figura 109. Gráfica comparativa de las relaciones de concentración de hoja / raíz en KTP y NPX ($C_{\text{hoja}} / C_{\text{raíz}}$) obtenidas con los resultados del modelo de simulación NPUM en las 10 EDAR estudiadas de la Región de Murcia. Fuente: elaboración propia

6.2.6.4. Cálculo del riesgo de consumo de lechugas para la salud humana

Una vez realizada la predicción de acumulación de KTP y NPX en las hojas y raíces de lechuga con el modelo de simulación NPUM, se calculó si la acumulación de KTP y NPX en las partes comestibles de las lechugas constituye un riesgo potencial para la salud humana debido a su incorporación a la cadena alimentaria en la hipótesis que se aprovecharan los efluentes de las EDAR estudiadas para el riego del cultivo de lechuga.

El cálculo se realizó siguiendo el método descrito en Hyland et al. (2015), en el cual la ingesta diaria humana de cada medicamento para cada variedad de lechuga se estimó multiplicando la concentración calculada para la porción comestible (ng g^{-1}) por el consumo medio de lechuga. ($9,00 \text{ g d}^{-1}$ para mujeres comprendidas entre 14 y 75 años con un peso corporal de 67,30 kg (Legind y Trapp, 2009). En las siguientes tablas (Tabla 32 y 33) se puede observar el consumo diario estimado de KTP por EDAR.

Tabla 32. Tabla de la ingestión estimada de KTP en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas

EDAR	Concentración de KTP en raíces ($\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$)	Concentración de KTP en hojas ($\text{ng}\cdot\text{g}^{-1}$)	Cantidad diaria de KTP consumida en lechuga (ng) ^a	Consumo diario estimado de KTP ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$, mujeres, peso 67,30kg) ^a	Consumo diario aceptable de KTP ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$) ^{a, b}
Alcantarilla (AL)	1,90	0,30	2,70	0,04	600,00
La Hoya - Lorca (LH)	3,50	0,50	4,50	0,06	600,00
Molina de Segura (MN)	0	0	0	0	600,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	0	0	0	0	600,00
Murcia Este (ME)	0,80	0,10	0,90	0,01	600,00
Caravaca de la Cruz (CC)	0,50	0,10	0,90	0,01	600,00
Puerto Lumbreras (PL)	0	0	0	0	600,00
San Javier (SJ)	0	0	0	0	600,00
Yecla (Y)	0	0	0	0	600,00
Cieza (Ci)	0	0	0	0	600,00

^a Calculado con la parte comestible de las lechugas

^b Prosser y Sibley, 2015

Tabla 33. Tabla de la ingestión estimada de NPX en el consumo de lechugas teniendo en cuenta el aprovechamiento del efluente en las EDAR estudiadas

EDAR	Concentración de NPX en raíces (ng·g ⁻¹)	Concentración de NPX en hojas (ng·g ⁻¹)	Cantidad diaria de NPX consumida en lechuga (ng) ^a	Consumo diario estimado de NPX (ng·kg ⁻¹ , mujeres, peso 67,30kg) ^a	Consumo diario aceptable de NPX (ng·kg ⁻¹ ·d ⁻¹) ^{a, b}
Alcantarilla (AL)	2,50	0,10	0,90	0,01	570.000,00
La Hoya - Lorca (LH)	8,50	0,30	2,70	0,04	570.000,00
Molina de Segura (MN)	0	0	0	0	570.000,00
Cabezo Beaza - Cartagena (CB)	8,50	0,30	2,70	0,04	570.000,00
Murcia Este (ME)	2,40	0,10	0,90	0,01	570.000,00
Caravaca de la Cruz (CC)	0	0	0	0	570.000,00
Puerto Lumbreras (PL)	33,90	1,00	9,00	0,13	570.000,00
San Javier (SJ)	0	0	0	0	570.000,00
Yecla (Y)	0	0	0	0	570.000,00
Cieza (Ci)	0	0	0	0	570.000,00

^a Calculado con la parte comestible de las lechugas^b Bruce et al., 2010

Tomando en consideración las ingestas diarias aceptables para KTP y NPX (Bruce et al., 2010; Prosser y Sibley, 2015), que indican la cantidad máxima de CE que una persona puede ingerir por día, se han calculado las cantidades estimadas de CE ingeridas por día y se ha obtenido que en el caso del KTP y NPX, la cantidad diaria estimada ingerida es prácticamente cero si se consumieran las hojas de lechuga (Tabla 32 y 33) en la hipótesis que se regaran con los efluentes de las EDAR estudiadas. Por este motivo, podríamos aprovechar los efluentes de las EDAR como agua de riego para el cultivo de las lechugas sin que esta práctica suponga riesgo alguno para la salud humana al incorporar dichos CEs en la cadena alimentaria consumiendo dichas lechugas.

VII - CONCLUSIONES

VII CONCLUSIONES

Los experimentos y estudios realizados en la presente Tesis Doctoral han llevado a las siguientes conclusiones:

- i. En el primer experimento realizado con cinco cultivos hortícolas (lechuga, perejil, col, brócoli y calabacín) regados con agua procedente de la EDAR Roldán, Lo Ferro y Balsicas con una concentración en el efluente de 10,11 ng l⁻¹ de CBZ, 6,64 ng l⁻¹ de DCF, 1,80 ng l⁻¹ de IBP, 18,97 ng l⁻¹ de KTP y 11,53 ng l⁻¹ de NPX, tan solo se encontró IBP en las hojas de lechuga Mini Romana variedad Jabera a una concentración 15,40 ± 0,32 ng g⁻¹. En los demás cultivos que fueron regados con el agua procedente del efluente de la EDAR no se detectó ningún CE. En la evaluación de los posibles riesgos potenciales para el ser humano que suponía el consumo de lechugas, los cálculos realizados no indicaron ningún riesgo para el ser humano al consumir lechugas con esta concentración de IBP en la parte comestible de las mismas.
- ii. En el segundo experimento realizado con tres variedades de lechuga (Lechuga Iceberg var. Gitana, lechuga Mini Romana var. Jabera y lechuga Hoja de Roble var. Kiprien), regadas con agua mezclada con CBZ y DCF a diferentes concentraciones (30, 60, 120 y 210 µg L⁻¹), se detectó CBZ y DCF en hojas y raíces en las tres variedades de lechuga estudiadas. En las hojas de la variedad Mini Romana, se encontraron las concentraciones más altas de CBZ y DCF. La concentración de CEs detectada en las hojas siguió la siguiente secuencia CBZ>DCF y en cuanto la concentración detectada en raíces respondió a la secuencia DCF>CBZ. Esta tendencia de mayor acumulación de la CBZ en hojas y del DCF en raíces, responde a factores como la evapotranspiración de los compuestos, las propiedades fisicoquímicas de los mismos y la retención del suelo. Los consumos diarios estimados de CBZ (194,84 ng·kg⁻¹) y DCF (11,00 ng·kg⁻¹) están por debajo del consumo diario aceptable (CBZ: 340,00 ng·kg⁻¹·d⁻¹; DCF: 67.000,00 ng·kg⁻¹·d⁻¹).

- ^{1-d-1}) y no representan ningún riesgo para la salud humana a la concentración de CE mezclada con agua más alta (210 $\mu\text{g L}^{-1}$).
- iii. La comparativa entre los resultados del segundo experimento y la predicción de absorción de CBZ y DCF realizada con los dos modelos de simulación SEI y NPUM, mostraron una buena predicción de la absorción de CE en hojas y raíces en las tres variedades de lechugas estudiadas con un R^2 en el caso de la absorción de CBZ en hojas y raíces superior al 92% con el modelo de simulación NPUM y un R^2 superior al 97% con el modelo de simulación SEI. Con respecto a la absorción de DCF con el modelo de simulación NPUM mostró un buen ajuste con un valor del 86% en hojas y un valor del 94% en las raíces, mientras que el modelo de simulación SEI mostró un R^2 superior al 97% en hojas y raíces. Los dos modelos de simulación mostraron una buena relación lineal entre ellos con un R^2 del 94% y 93% en la predicción de absorción CBZ y DCF en hojas y raíces respectivamente.
 - iv. Los resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF en la lechuga Mini Romana var. Jabera realizados con el modelo de simulación SEI en 10 EDAR representativas de la Región de Murcia, aportaron una concentración de CBZ en hojas en la secuencia siguiente en las EDAR: PL>AL>LH>Y>ME>CC>SJ>CB y una concentración en raíces en las EDAR en la secuencia: PL>AL>LH>Y>ME>CC>SJ>CB. Con respecto a la predicción de la concentración de DCF en las hojas de la lechuga, el valor en todas las EDAR fue igual a cero y una concentración en raíces en las EDAR en la secuencia siguiente: LH>AL>ME. Los consumos diarios estimados ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$) de CBZ y DCF están muy por debajo del consumo diario aceptable ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$) en todas las lechugas que aprovecharan el efluente de las EDAR como agua de riego, no representando ningún riesgo para la salud humana.
 - v. En el modelo de simulación NPUM, los resultados de predicción de absorción de CBZ y DCF en la lechuga Mini Romana var. Jabera realizados en las EDAR estudiadas de la Región de Murcia, aportaron una concentración de CBZ en hojas en la secuencia siguiente en las EDAR: PL>AL>LH>Y>CC>ME>SJ>CB y una concentración en raíces en las EDAR en la secuencia: PL>AL>LH>Y>CC>ME>SJ>CB. Con respecto a la predicción de la concentración de DCF en las hojas de la lechuga, el valor obtenido fue

cercano a cero en las EDAR en una secuencia: ME>AL=LH y una concentración en raíces en las EDAR en la secuencia siguiente: ME>LH>AL. Los consumos diarios estimados ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$) de CBZ y DCF están muy por debajo del consumo diario aceptable ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$) en todas las lechugas que aprovecharan el efluente de las EDAR como agua de riego, no representando ningún riesgo para la salud humana. Comparando los resultados de predicción en las EDAR estudiadas en los dos modelos de simulación, los valores de concentración fueron más altos en el modelo SEI que en el modelo NPUM en todos los casos.

- vi. Los resultados de predicción de absorción de IBP, KTP y NPX mezclada con el agua de riego a diferentes concentraciones realizados con el modelo de simulación NPUM en las tres variedades de lechuga a diferentes concentraciones (30, 60, 120 y 210 $\mu\text{g L}^{-1}$), confirmaron concentración de IBP, KTP y NPX en hojas y raíces en las tres variedades de lechuga estudiadas. En las hojas y raíces de la variedad Mini Romana, se encontraron las concentraciones más altas de los CE estudiados. Las concentraciones de IBP, KTP y NPX fueron más altas en raíces que en hojas y los consumos diarios estimados de IBP, KTP y NPX ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$) están por debajo del consumo diario aceptable ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$) y no representan ningún riesgo para la salud humana a la concentración de CE simulada más alta (210 $\mu\text{g L}^{-1}$).
- vii. Los resultados de predicción de absorción de KTP y NPX en la lechuga Mini Romana var. Jabera realizados con el modelo de simulación NPUM en 10 EDAR estudiadas de la Región de Murcia, aportaron una concentración de KTP cercana a cero en hojas en la siguiente secuencia de las EDAR: LH>AL>ME=CC y una concentración en raíces en las EDAR en la secuencia: LH>AL>ME>CC. Con respecto a la predicción de la concentración de NPX en las hojas de la lechuga, el valor obtenido fue cercano a cero en las EDAR en una secuencia: PL>LH=CB>AL y una concentración en raíces en las EDAR en la secuencia siguiente: PL>LH=CB>AL>ME. Los consumos diarios estimados ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}$) de KTP y NPX están muy por debajo del consumo diario aceptable ($\text{ng}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{d}^{-1}$) en todas las lechugas que aprovecharan el efluente de las EDAR como agua de riego, no representando ningún riesgo para la salud humana.

- viii. Los experimentos y las simulaciones realizadas confirman que el aprovechamiento de los efluentes de las EDAR a las concentraciones estudiadas como agua de riego para el cultivo de hortícolas, es una alternativa viable sin que esta práctica suponga riesgo alguno para la salud humana al incorporar dichos CE en la cadena alimentaria consumiendo dichos cultivos.

VIII – LIMITACIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

VIII –LIMITACIONES Y FUTURAS LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Con esta tesis se ha realizado una primera aproximación a la presencia y la acumulación de CEs en los cultivos hortícolas que son regados con el agua procedente de las EDAR en la Región de Murcia. De igual modo, se ha realizado una simulación de predicción de acumulación de CEs en el cultivo de lechuga utilizando dos herramientas de modelización tomando como principal dato de entrada las concentraciones de CEs en el agua de riego se puede obtener el resultado de la acumulación de los CEs en las diferentes partes de la planta, lo que supone un ahorro de costes de personal en toma de muestras, analíticas, laboratorio, ...

Las principales líneas de investigación propuestas serían las siguientes:

- Realización de experimentos en campo de absorción de diferentes CEs a los propuestos en esta tesis.
- Experimentación con cultivos hortícolas diferentes a los estudiados en esta Tesis Doctoral.
- Calibración de las dos herramientas de modelización con otros CEs y en otros cultivos hortícolas.
- Seguir profundizando e investigando en el estado del arte de la modelización de captación de CEs con la finalidad de calibrar y ajustar con mayor exactitud los resultados de absorción con los parámetros de entrada propios de cada modelo.
- Evaluar los modelos validados obtenidos en zonas distintas de la Región de Murcia con diferentes condiciones climáticas a las analizadas en el objeto de la tesis.
- Investigar y experimentar con otros modelos cuya simulación presenten resultados de absorción y de esta manera poder comparar los resultados en diferentes entornos.
- Analizar los resultados en los influentes y los efluentes de las EDAR de otras zonas de la Región de Murcia y así poder comparar las CEs obtenidas.

- Obtener con los efluentes de las EDAR de otras zonas de la Región de Murcia, mapas de predicción de absorción de CEs en cultivos hortícolas comparando su acumulación y concentración en tejidos vegetales por zonas geográficas.
- Realizar experimentos en diferentes variedades de plantas que no se utilicen para consumo humano y así poder valorar su potencial de absorción de CEs para posibles usos como plantas regeneradoras de suelos contaminados al absorber y acumular dichos CEs.
- Utilizar en los experimentos en campo sustratos diferentes al empleado en los experimentos realizados en esta tesis para profundizar en su influencia en la adsorción de coloides y retención de CEs.

IX – REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

IX –REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS**BIBLIOGRAFÍA**

Aiello, R., Cirelli, G.L., Consoli, S. (2007). Effects of reclaimed wastewater irrigation on soil and tomato fruits: a case study in Sicily (Italy). *Agric. Water Manag.*, 93 (1–2), 65–72.

Al-Hamaiedeh, H., Bino, M. (2010). Effect of treated grey water reuse in irrigation on soil and plants. *Desalination*, 256 (1–3), 115–119.

Al-Lahham, O., El Assi, N.M., Fayyad, M. (2003). Impact of treated wastewater irrigation on quality attributes and contamination of tomato fruit. *Agric. Water Manag.*, 61 (6), 51–62.

Al-Nakshabandi, G.A., Saqqar, M.M., Shatanawi, M.R., Fayyad, M., Al-Horani, H. (1997). Some environmental problems associated with the use of treated wastewater for irrigation in Jordan. *Agric. Water Manag.*, 34 (1), 81–94.

Anderson, J. (2003). The environmental benefits of water recycling and reuse. *Water Supply*, 3, 1–10.

Angelakis, A.N., Bontoux, L. (2001). Wastewater reclamation and reuse in Eureau countries. *Water Policy*, 31, 47–59.

Angelakis, A.N., Bontoux, L., Lazarova, V. (2003). Challenges and prospectives for water recycling and reuse in EU countries. *Water Supply*, 3, 59–68.

Aryal, N., Reinhold, D.M. (2011). Phytoaccumulation of antimicrobials from biosolids: impacts on environmental fate and relevance to human exposure. *Water Res.*, 45, 5545–5552.

228 CAPÍTULO IX: REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Barbaglio, S., Cirelli, G.L., Indelicato, S. (2001). Wastewater reuse in Italy. *Water Sci. Technol.*, 43, 43–50.
- Barbosa, M.O., Moreira, N.F.F., Ribeiro, A.R., Pereira, M.F.R., Silva, A.M.T. (2016). Occurrence and removal of organic micropollutants: an overview of the watch list of EU Decision 2015/495. *Water Res.*, 94, 257–279.
- Belfroid, A.C., Van Der Horst, A., Vethaak, A.D., Schäfer, A.J., Rijs, G.B.J., Wegener, J., Cofino, W.P. (1999). Analysis and occurrence of estrogenic hormones and their glucuronides in surface water and waste water in the Netherlands. *Sci. Total Environ.*, 225, 101–108.
- Bixio, D., De Koning, J., Savic, D., Wintegens, T., Melin, T. and Thoeye, C. (2005). Wastewater use in Europe. p. 80–92. In S.J. Khan et al. (ed.) *Integrated concepts in water recycling*. Univ. of Wollongong, Wollongong, Australia.
- Boland, A. M., Hamilton, A.J., Stevens, D.P., Kelly, J., Marks, J., Nancarrow, B.E., Po, M., Wos, M., Faggian, R., Jarwal, S., Engleitner, S., Stagnitti, F. (2005). Use of recycled water in Australian horticulture. In *OzWater Convention and Exhibition, Brisbane [CD-ROM]*. 5–7 May. Aust. Water Assoc., Sydney.
- Briggs, G.G., Bromilow, R.H., Evans, A.A. (1982). Relationships between lipophilicity and root uptake and translocation of non-ionised chemicals by barley. *Pest. Sci.*, 13, 495–504.
- Bruce, G. M., Pleus, R. C., Snyder, S. A. (2010). Toxicological Relevance of Pharmaceuticals in Drinking Water. *Environ. Sci. Technol.*, 44, 5619–5626.
- Burken, J.G., Schnoor, J.L. (1998) Predictive relationships for uptake of organic contaminants by hybrid poplar trees. *Environ. Sci. Technol.* 32, 3379–3385.
- California Department of Health Services. (2001). California health laws related to recycled water: “The Purple Book.” Calif. Dep. of Health Services, Sacramento.

- Camacho-Muñoz, D., Martín, J., Santos, J.L., Aparicio, I., Alonso, E. (2009). An affordable method for the simultaneous determination of the most studied pharmaceutical compounds as wastewater and surface water pollutants. *J. Sep. Sci.*, 32, 3064–3073.
- Carter, L. J., Harris, E., Williams, M., Ryan, J. J., Kookana, R. S., Boxall, A. B. A. (2014). Fate and uptake of pharmaceuticals in soil plant systems. *J. Agric. Food Chem.*, 62, 816–825.
- Castiglioni, S., Fanelli, R., Calamari, D., Bagnati, R., Zuccato, E. (2004). Methodological approaches for studying pharmaceuticals in the environment by comparing predicted and measured concentrations in river Po, Italy. *Regul. Toxicol. Pharm.*, 39, 25–32.
- Chen, F., Ying, G.G., Kong, L.X., Wang, L., Zhao, J.L., Zhou, L.J., Zhang, L.J. (2011). Distribution and accumulation of endocrine disrupting chemicals and pharmaceuticals in wastewater irrigated soils in Hebei, China. *Environ. Pollut.*, 159, 1490–1498.
- Chu, J., Chen, J., Wang, C. and Fu, P. (2004). Wastewater reuse potential analysis: Implications for China's water resources management. *Water Res.*, 38, 2746–2756.
- Cornish, G., Aidoo, J.B. (2000). Informal irrigation in the peri-urban zone of Kumasi, Ghana. p. 41. In Findings from an initial questionnaire survey. Rep. OD/TN97. HR Wallingford Ltd., Wallingford, UK.
- Cornish, G.A., Aidoo, J.B. Ayamba, I. (2001). Informal irrigation in the periurban zone of Kumasi: An analysis of farmers' activity and productivity. Rep. OD/TN103. HR Wallingford Ltd., Wallingford, UK.
- Deng, X.P., Shan, L., Zhang, H., Turner, N.C. (2006). Improving agricultural water use efficiency in arid and semiarid areas of China. *Agric. Water Manage.*, 80, 23–40.
- Dettenmaier, E.M., Doucette, W.I., Bugbee, B. (2009). Chemical hydrophobicity and uptake by plant roots. *Environ. Sci. Technol.*, 43, 324–329.
- Dodgen, L.K., Li, J., Parker, D., Gan, J.J. (2013). Uptake and accumulation of four PPCP/EDCs in two leafy vegetables. *Environ. Pollut.*, 182, 150-156.

230 CAPÍTULO IX: REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Dodgen, L.K., Ueda, A., Wu, X., Parker, D.R., Gan, J. (2015). Effect of transpiration on plant accumulation and translocation of PPCP/EDCs. *Environ. Pollut.*, 198, 144–153.

Doll, P., Hoffmann-Dobrev, H., Portmann, F.T., Siebert, S., Eicker, A., Rodell, M., Strassberg, G., Scanlon, B.R. (2012). Impact of water withdrawals from groundwater and surface water on continental water storage variations. *J. Geodyn.*, 59–60, 143–156.

Drewes, J.E., Fox, P., Jekel, M. (2001). Occurrence of iodinated X-Ray contrast media in domestic effluents and their fate during indirect potable reuse. *J. Environ. Sci. Health., Part A* 36, 1633–1645.

Ensink, J.H.J., Simmons, R.W., Van der Hoek, W. (2004). Wastewater use in Pakistan: The cases of Haroonabad and Faisalabad. p. 91–100. In C.A. Scott et al. (ed.) *Wastewater use in irrigated agriculture: Confronting the livelihood and environmental realities*. CABI Publ., Wallingford, UK.

ESAMUR, (1 de agosto de 2018). Entidad de Saneamiento y Depuración de Aguas Residuales de la Región de Murcia. Recuperado de <http://www.esamur.com>.

Esau, K. (1958). *Plant Anatomy*. John Wiley and Sons, New York.

FAO. (2001). Experience of Food and Agriculture Organization of the United Nations on wastewater reuse in the Near East region: Proc. Regional Worksh. on Water Reuse in the Middle East and North Africa, Cairo, Egypt. FAO, Rome.

FAO. (2003). *Agriculture, food and water. A contribution to the World Water Development Report*. FAO, Rome.

Faruqui, N.I., Niang, S., Redwood, M. (2004). Untreated wastewater use in market gardens: A case study of Dakar, Senegal. p. 113–126. In C.A. Scott et al. (ed.) *Wastewater use in irrigated agriculture: Confronting the livelihood and environmental realities*. CABI Publ., Wallingford, UK.

Fernández-López, C., Guillén-Navarro, J.M., Padilla, J.J., Parsons, J.R. (2016). Comparison of the removal efficiencies of selected pharmaceuticals in wastewater treatment plants in the region of Murcia, Spain. *Ecol. Eng.*, 95, 811–816.

Flyborg, L., Bjarlenius, B., Persson, K.M. (2010). Can treated municipal wastewater be reused after ozonation and nanofiltration? Results from a pilot study of pharmaceutical removal in Henriksdal WWTP, Sweden. *Water Sci. Technol.*, 61(5), 1113–1120.

Goldstein, M., Shenker, M., Chefetz, M. (2014). Insights into the uptake processes of wastewater-borne pharmaceuticals by vegetables. *Environ. Sci. Technol.*, 48, 5593–5600.

Green, T.R., Taniguchi, M., Kooi, H., Gurdak, J.J., Allen, D.M., Hiscock, K.M., Treidel, H., Aureli, A. (2011). Beneath the surface of global change: impacts of climate change on groundwater. *J. Hydrol.*, 405(3–4), 532–560.

Grobicki, A. (2000). Water reclaimed in South Africa. In Proc. AWWA/WEF Water Reuse Conf., San Antonio, TX [CD-ROM]. 30 Jan–2 Feb. 2000. Am. Water Works Assoc., Denver, CO.

Halling-Sørensen, B., Nors Nielsen, S., Lanzky, P.F., Ingerslev, F., Lützhøft, H.C.H., Jørgensen, S.E. (1998). Occurrence, fate and effects of pharmaceutical substances in the environment - a review. *Chemosphere*, 36 (2), 357-393.

Hamilton, A.J., Boland, A. M., Stevens, D., Kelly, J., Radcliffe, J., Ziehl, A., Dillon, P.J., Paulin, R. (2005). Position of the Australian horticultural industry with respect to the use of reclaimed water. *Agric. Water Manage.*, 71, 181–209.

Hamilton, A.J., Stagnitti, F., Versace, V.L., Li, P., Yin, W., Maher, P., Hermon, K., Premier, R.R., Ierodiaconou, D. (2006). Balancing environmental impacts and benefits of wastewater reuse. *WSEAS Trans. Environ. Develop.*, 2, 117–129.

Haruvy, N., Offer, R., Hadas, A., Ravina, I. (1999). Wastewater irrigation-economic concerns regarding beneficial and hazardous effects of nutrients. *Water Resour. Manag.*, 13(5), 303–314.

232 CAPÍTULO IX: REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Herklotz, P.A., Gurung, P., Vanden Heuvel, B.V., Kinney, C.A. (2010). Uptake of human pharmaceuticals by plants grown under hydroponic conditions. *Chemosphere*, 78, 1416–1421.
- Hirsch, R., Ternes, T., Haberer, K., Kratz, K.L. (1999). Occurrence of antibiotics in the aquatic environment. *Sci. Total Environ.*, 225, 109–118.
- Hörsing, M., Ledin, A., Grabic, R., Fick, J., Tysklind, M., Jansen, J., Andersen, H.R. (2011). Determination of sorption of seventy-five pharmaceuticals in sewage sludge. *Water Res.*, 45(15), 4470–4482.
- Huang, G. B. (2014). An insight into extreme learning machines: random neurons, random features and kernels. *Cognitive Computation*, 6, 376-390.
- Huang, G. B., Zhu, Q. Y., Siew, C.K. (2006). Extreme learning machine: theory and applications. *Neurocomputing*, 70, 489-501.
- Hurtado, C., Domínguez, C., Pérez-Babace, L., Cañameras, N., Comas, J., Bayona, J.M. (2016). Estimate of uptake and translocation of emerging organic contaminants from irrigation water concentration in lettuce grown under controlled conditions. *J. Hazard. Mater.*, 305, 139–148.
- Hurtado, C., Trapp, S., Bayona, J. M. (2016). Inverse modeling of the biodegradation of emerging organic contaminants in the soil-plant system. *Chemosphere*, 156, 236–244.
- Hyland, K.C., Blaine, A.C., Dickenson, E.R.V., Higgins, C.P. (2015). Accumulation of contaminants of emerging concern in food crops – Part 1: Edible strawberries and lettuce grown in reclaimed water. *Environ. Toxicol. Chem.*, 34 (10), 2213–2221.
- Japan Sewage Works Association. (2002). Making great breakthroughs: All about the sewage works in Japan. JSWA, Tokyo.

- Kasprzyk-Hordern, B., Dinsdale, R.M., Guwy, A.J. (2007). Multi-residue method for the determination of basic/neutral pharmaceuticals and illicit drugs in surface water by solid-phase extraction and ultra performance liquid chromatography–positive electrospray ionisation tandem mass spectrometry. *J. Chromatogr. A.*, 1161(1-2), 132–145.
- Kerler, F. Schonherr, J. (1988). *Arch. Environ. Contam. Toxicol.*, 17, 7-12.
- Kiziloglu, F.M., Turan, M., Sahin, U., Angin, I., Anapali, O., Okuroglu, M. (2007). Effects of wastewater irrigation on soil and cabbage-plant (*brassica oleracea* var. *capitata* cv. *yalova-1*) chemical properties. *Z Pfl anzenernaehr Bodenkd.*, 170, 166–172.
- Kolpin, D.W., Furlong, E.T., Meyer, M.T., Thurman, E.M., Zaugg, S. D., Barber, L.B., Buxton, H.T. (2002). Pharmaceuticals, hormones, and other organic wastewater contaminants in US streams, 1999-2000: a national reconnaissance. *Environ. Sci. Technol.*, 36, 1202-1211.
- Kruskal, W.H. (1957). Historical notes on the wilcoxon unpaired two-sample test. *Journal of the American Statistical Association*, 52(279), 356–360.
- Kumar, K., Gupta, S. C. (2016). A Framework to Predict Uptake of Trace Organic Compounds by Plants. *J. Environ. Qual.*, 45, 555–564.
- Lawhon, P., Schwartz, M. (2006). Linking environmental and economic sustainability in establishing standards for wastewater re-use in Israel. *Water Sci. Technol.*, 53, 203–212.
- Legind, C. N., Trapp, S. (2009). Modeling the exposure of children and adults via diet to chemicals in the environment with crop-specific models. *Environ. Pollut.*, 157, 778–785.
- Lienert, J., Gudel, K., Escher, B. (2007). Screening method for ecotoxicological hazard assessment of 42 pharmaceuticals considering human metabolism and excretory routes. *Environ. Sci. Technol.*, 41(12), 4471-4478.

Lipinski, C. A., Lombardo, F., Dominy, B. W., Feeney, P.J. (2001). Experimental and computational approaches to estimate the solubility and permeability in drug discovery and developmental settings. *Adv. Drug Delivery Rev.*, 46, 3–26.

Loos, R., Gawlik, B. M., Locoro, G., Rimaviciute, E., Contini, S., Bidoglio, G. (2009). EU-wide survey of polar organic persistent pollutants in European river waters. *Environ. Pollut.*, 157(2), 561-568.

Malchi, T., Maor, Y., Tadmor, G., Shenker, M., Chefetz, B. (2014). Irrigation of root vegetables with treated wastewater: evaluating uptake of pharmaceuticals and the associated human health risks. *Environ. Sci. Technol.*, 48, 9325–9333.

Marsalek, J., Schaefer, K., Excall, K., Brannen, L., Aidun, B. (2002). Water reuse and recycling. Rep. 3. CCME Ser.: Linking Water Science to Policy. Can. Council of Ministers of the Environ. Winnipeg, MB.

Martínez-Alcalá, I., Guillén-Navarro, J.M., Fernández-López, C. (2017). Pharmaceutical biological degradation, sorption and mass balance determination in a conventional activated-sludge wastewater treatment plant from Murcia, Spain. *Chem. Eng. J.*, 95, 811–816.

Martínez-Alcalá, I., Pellicer-Martínez, F., Fernández-López, C. (2018). Pharmaceutical grey water footprint: Accounting, influence of wastewater treatment plants and implications of the reuse. *Water Res. J.*, 135, 278–287.

McCornick, P., Haddadin, N., Rashid, H., Sabella, R. (2001). Water reuse in Wadi Zarqa and from other Amman-Zarqa sources. Water Reuse Component Working Paper, Water Policy Support Project. Ministry of Water and Irrigation, Amman, Jordan.

Miao, X.S., Bishay, F., Chen, M., Metcalfe, C.D. (2004). Occurrence of antimicrobials in the final effluents of wastewater treatment plants in Canada. *Environ. Sci. Technol.*, 38, 3533–3541.

- Miche, Y., Sorjamaa, A., Bas, P., Simula, O., Jutten, C., Lendasse, A. (2010). Op-elm: optimally pruned extreme learning machine. *IEEE Transactions on Neural Networks* 21, 158–162.
- Miege, C., Choubert, J.M., Ribeiro, L., Eusebe, M., Coquery, M. (2008). Removal efficiency of pharmaceuticals and personal care products with varying wastewater treatment processes and operating conditions – conception of a database and first results. *Water Sci. Technol.*, 57(1), 49–56.
- Ministry of Agriculture. (1998). Développement de la stratégie pour promouvoir la réutilisation des eaux usées épurées dans le secteur agricole ou autres. Direction Générale de Ressources en Eau, Groupement Bechtel International/SCET, Tunisia.
- Moreno-González, R., Rodriguez-Mozaz, S., Gros, M., Barceló, D., León, V.M. (2015). Seasonal distribution of pharmaceuticals in marine water and sediment from a mediterranean coastal lagoon (SE Spain). *Environ. Res.*, 138, 326–344.
- Murillo, J.M., Lopez, R., Fernandez, J.E., Cabrera, F. (2000). Olive tree response to irrigation with wastewater from the table olive industry. *Irrig. Sci.*, 19(4), 175–180.
- National Center for Environmental Assessment. (2011). USEPA. Exposure Factors Handbook: 2011 Edition. US Environmental Protection Agency, Washington DC.
- Ogoshi, M., Suzuki, Y., Asano, T. (2001). Water reuse in Japan. *Water Sci. Technol.*, 43, 17–23.
- Oron, G. (1998). Water resources management and wastewater reuse for agriculture in Israel. p. 757–778. In T. Asano (ed.) *Wastewater reclamation and reuse*. CRC Press, Boca Raton, FL.
- Paltiel, O., Fedorova, G., Tadmor, G., Kleinstern, G., Maor, Y., Chefetz, B. (2016). Human exposure to wastewater-derived pharmaceuticals in fresh produce: a randomized controlled trial focusing on carbamazepine. *Environ. Sci. Technol.*, 50, 4476–4482.

Peasey, A., Blumenthal, U.J., Mara, D.D., Ruiz-Palacois, G. (2000). A review of policy and standards for wastewater reuse in agriculture: A Latin American perspective. *Water Eng. Dev. Ctr.*, Loughborough, UK.

Pellicer-Martínez, F., Martínez-Paz, J. M. (2018). Probabilistic evaluation of the water footprint of a river basin: Accounting method and case study in the Segura River Basin, Spain. *Sci. Total Environ.*, 627, 28-38.

Pereira, B.F.F., He, Z.L., Stoffella, P.J., Melfi, A.J. (2011). Reclaimed wastewater: effects on citrus nutrition. *Agric. Water Manag.*, 98(12), 1828–1833.

Petrovic, M., Hernando, M.D., Díaz-Cruz, M.S., Barceló, D. (2005). Liquid chromatography–tandem mass spectrometry for the analysis of pharmaceutical residues in environmental samples: a review. *J. Chromatogr. A*, 1067, 1–14.

Plósz, B.G., Benedetti, L., Daigger, G.T., Langford, K.H., Larsen, H.F., Monteith, H., Ort, C., Seth, R., Steyer, J.P., Vanrolleghem, P.A. (2013). Modelling micro-pollutant fate in wastewater collection and treatment systems: status and challenges. *Water Sci. Technol.*, 67 (1), 1-15.

Prosser, R.S., Sibley, P.K. (2015). Human health risk assessment of pharmaceuticals and personal care products in plant tissue due to biosolids and manure amendments, and wastewater irrigation. *Environ. Int.*, 75, 223–233.

Putschew, A., Wischnack, S., Jekel, M. (2000). Occurrence of triiodinated X-Ray contrast agents in the aquatic environment. *Sci. Total Environ.*, 255, 129–134.

Qadir, M., Sharma, B.R., Bruggeman, A., Choukr-Allah, R., Karajeh, F. (2007). Non-conventional water resources and opportunities for water augmentation to achieve food security in water scarce countries. *Agric. Water Manag.*, 87(1), 2–22.

Qishlaqi, A., Moore, F. (2006). Impacts of wastewater irrigation on soils and crops in suburban area of Shiraz, Iran. *Chin. J. Geochem.*, 25(1), 214.

- Radcliffe, J. (2003). An overview of water recycling in Australia: Results of the recent ATSE study. In T. Gardner and D. McGarry (ed.) *Water Recycling Australia: Natl. Conf.*, 2nd, Brisbane [CD-ROM]. 1–2 Sept. 2003. Aust. Water Assoc., Sydney.
- Radcliffe, J.C. (2004). *Water recycling in Australia*. Aust. Acad. of Technol. Sci. and Eng. Parkville, Australia.
- Radjenovic, J., Petrovic, M., Barcelo, D. (2007). Analysis of pharmaceuticals in wastewater and removal using a membrane bioreactor. *Anal. Bioanal. Chem.*, 387(4), 1365–1377.
- Recycled Water Taskforce. (2003). *Water recycling 2030: Recommendations of California's Recycled Water Taskforce*. Calif. Dep. of Water Resour. Sacramento.
- Redondo, J.A., Lomax, I. (1997). Experiences with the pretreatment of raw water with high fouling potential for reverse osmosis plant using FILMTEC membranes. *Desalination*, 110 (1–2), 167–182.
- Reuse Coordinating Committee and Water Reuse Work Group. (2003). *Water reuse for Florida: Strategies for effective use of reclaimed water*. Dep. of Environmental Protection, Tallahassee, FL.
- Riederer, M. (1995). Partitioning and transport of organic chemicals between the atmospheric environment and leaves. S Trapp, JC McFarlane, eds, *Plant Contamination. Modeling and Simulation of Organic Chemical Processes*. Lewis Publishers, Boca Raton, 153-190.
- Rijsberman, F.R. 2006. Water scarcity: fact or fiction? *Agric. Water Manag.*, 80(1–3), 5–22.
- Rosal, R., Rodríguez, A., Perdigón-Melón, J. A., Petre, A., García-Calvo, E., Gómez, M. J., Agüera, A., Fernández-Alba, A. R. (2010). Occurrence of emerging pollutants in urban wastewater and their removal through biological treatment followed by ozonation. *Water Res.*, 44(2), 578-588.

238 CAPÍTULO IX: REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Rosenqvist, H., Aronsson, P., Hasselgren, K., Perttu, K. (1997). Economics of using municipal wastewater irrigation of willow coppice crops. *Biomass Bioenerg.*, 12(1), 1–8.

Santiago, S., Roll, D.M., Ray, C., Williams, C., Moravcik, P., Knopf, A. (2016). Effects of soil moisture depletion on vegetable crop uptake of pharmaceuticals and personal care products (PPCPs). *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 23, 20257-20268.

Schnoor, J.L., Licht, L.A., McCutcheon, S.C., Wolfe, N.L., Carreira, L.H. (1995). Phytoremediation of organic and nutrient contaminants. *Environ. Sci. Technol.*, 29, 318–323.

Serre, D. (2002). *Matrices: Theory and applications*. Graduate Texts in Mathematics.

Shenker, M., Harush, D., Ben-Ari, J., Chefetz, B. (2011). Uptake of carbamazepine by cucumber plants – A case study related to irrigation with reclaimed wastewater. *Chemosphere*, 82, 905–910.

Shetty, S. (2004). Treated wastewater use in Tunisia: Lessons learned and the road ahead. p. 163–172. In C.A. Scott et al. (ed.) *Wastewater use in irrigated agriculture: Confronting the livelihood and environmental realities*. CABI Publ., Wallingford, UK.

Siebert, S., Burke, J., Faures, J.M., Frenken, K., Hoogeveen, J., Doll, P., Portmann, F.T. (2010) Groundwater use for irrigation – a global inventory. *Hydrol. Earth. Syst. Sci.*, 7, 3977–4021.

Simila, T., Tikka, J. (2005). Multiresponse sparse regression with application to multidimensional scaling. In *International Conference on Artificial Neural Networks* (Springer), 97–102.

Simonich, S.L., Hites, R.A. (1995). Organic pollutant accumulation in vegetation. *Environ. Sci. Technol.*, 29, 2905–2914.

- Singh, P.K., Deshbhratar, P.B., Ramteke, D.S. (2012). Effects of sewage wastewater irrigation on soil properties, crop yield and environment. *Agric. Water Manag.*, 103, 100–104.
- Soulet, B., Tauxe, A., Tarradellas, J. (2002). Analysis of acidic drugs in Swiss wastewaters. *Int. J. Environ. Anal. Chem.*, 82, 659–667.
- Sui, Q., Huang, J., Deng, S., Yu, G., Fan, Q. (2010). Occurrence and removal of pharmaceuticals, caffeine and DEET in wastewater treatment plants of Beijing, China. *Water Res.*, 44, 417–426.
- Tanoue, R., Sato, Y., Motoyama, M., Nakagawa, S., Shinohara, R., Nomiya, K. (2012). Plant uptake of pharmaceutical chemicals detected in recycled organic manure and reclaimed wastewater. *J. Agr. Food Chem.*, 60, 10203–10211.
- Temme, E. H. M., Vandevijvere, S., Vinkx, C., Huybrechts, I., Goeyens, L., Van Oyen, H. (2011). Average daily nitrate and nitrite intake in the Belgian population older than 15 years. *Food Addit. Contam.*, 28 (9), 1193–1204.
- Ternes, T.A. (1998). Occurrence of drugs in German sewage treatment plants and rivers. *Water Res.*, 32(11), 3245–3260.
- Ternes, T.A., Hirsch, R. (2000). Occurrence and behavior of X-ray contrast media in sewage facilities and the aquatic environment. *Environ. Sci. Technol.*, 34, 2741–2748.
- Ternes, T.A., Stumpf, M., Mueller, J., Haberer, K., Wilken, R.D., Servos, M. (1999). Behavior and occurrence of estrogens in municipal sewage treatment plants-I. Investigations in Germany, Canada and Brazil. *Sci. Total Environ.*, 225, 81–90.
- Topp, E., Scheunert, I., Attar, A., Korte, F. (1986). Factors affecting the uptake of C-14-labeled organic-chemicals by plants from soil. *Ecotoxicol. Environ. Safety*, 11, 219–228.

240 CAPÍTULO IX: REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Trapp, S. (1995). Model for uptake of xenobiotics in plants. In: S. Trapp and C. Mc Farlane, editors, *Plant contamination: Modeling and simulation of organic chemical processes*. Lewis Publ., Boca Raton, FL. 107–152.

Trapp, S. (2000). Modeling uptake into roots and subsequent translocation of neutral and ionisable organic compounds. *Pest Manage. Sci.* 56, 767–778.

Trapp S (2004) Plant uptake and transport models for neutral and ionic chemicals. *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 11, 33–39.

Trapp S (2007). Fruit tree model for uptake of organic compounds from soil and air. SAR - QSAR *Environ. Res.*, vol 18, 3-4, 367-387.

Trapp, S. (2009). Bioaccumulation of polar and ionizable compounds in plants, p. 299–353. In J. Devillers (ed.), *Ecotoxicology modeling*. Springer, New York, NY

Trapp, S., Matthies, M. (1997). *Chemodynamics and Environmental Modeling. An introduction*. Springer.

Trapp, S., Matthies, M., McFarlane, C. (1994). Model for uptake of xenobiotics into plants: Validation with bromacil experiments. *Environ. Toxicol. Chem.*, 13, 413–422.

USEPA. (2004). Guidelines for water reuse. Rep. EPA/625/R-04/108. USEPA, Washington, DC.

Van der Hoek, W. (2004). A framework for a global assessment of the extent of wastewater irrigation: The need for a common wastewater typology. p. 11–24. In C.A. Scott et al. (ed.) *Wastewater use in irrigated agriculture: Confronting the livelihood and environmental realities*. CABI Publ., Wallingford, UK.

Wagner, T. (2006). Water reuse and rainwater utilization practices expand in Brazil. Recuperado de <http://www.strategis.ic.gc.ca/epic/internet/inimr-ri.nsf/en/gr124805e.html>. Dep. of Commerce, Ottawa, ON, Canada.

- Wallace, J.S. (2000). Increasing agricultural water efficiency to meet future food production. *Agric. Ecosyst. Environ.*, 82, 105–119.
- Wang, J.F., Wang, G. X., Wanyan, H. (2007). Treated wastewater irrigation effect on soil, crop and environment: wastewater recycling in the loess area of China. *J. Environ. Sci.*, 19(9), 1093–1099.
- Wang, R., Ouyang, Z., Ren, H., Min, Q. (1999). China water vision: The eco-sphere of water, environment, life, economy, and society. Res. Ctr. For Eco-Environ. Sci., Chinese Acad. of Sci., Beijing.
- Wang, X.C., Jin, P.K. (2006). Water shortage and needs for wastewater re-use in the north China. *Water Sci. Technol.*, 53, 35–44.
- Weber, S., Khan, S., Hollender, J. (2006). Human risk assessment of organic contaminants in reclaimed wastewater used for irrigation. *Desalination*, 187(1–3), 53–64.
- World Health Organization (WHO). (2006). WHO guidelines for the safe use of wastewater, excreta and greywater, 4 volumes. World Health Organization Press, Geneva.
- Worldwatch Institute. (2006). State of the World 2006: Special Focus—China and India. Worldwatch Inst., Washington, DC.
- Wu, X., Conkle, J.L., Gan, J. (2012b). Multi-residue determination of pharmaceutical and personal care products in vegetables. *J. Chromatogr. A*, 1254, 78–86.
- Wu, C., Spongberg, A.L., Witter, J.D., Fang, M., Czajkowski, K.P. (2010.) Uptake of pharmaceutical and personal care products by soybean plants from soil supplied with biosolids and irrigated with contaminated water. *Environ. Sci. Technol.*, 44, 6157–6161.
- Wu, X., Ernst, F., Conkle, J. L., Gan, J. (2013). Comparative uptake and translocation of pharmaceutical and personal care products (PPCPs) by common vegetables. *Environ. International*, 60, 15-22.

242 CAPÍTULO IX: REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Yuan, S., Jiang, X., Xia, X., Zhang, H., Zheng, S. (2013). Detection, occurrence and fate of 22 psychiatric pharmaceuticals in psychiatric hospital and municipal wastewater treatment plants in Beijing, China. *Chemosphere*, 90, 2520– 2525.

Zhang, D. Q., Hua, T., Gersberg, R. M., Zhu, J., Ng, W. J., Tan, S. K. (2012). Fate of diclofenac in wetland mesocosms planted with *Scirpus validus*. *Ecol. Eng.*, 49, 59-64.

X – ANEXOS

X –ANEXOS

ANEXO I: DATOS DEL PRIMER EXPERIMENTO.

Tabla S1.

Análisis de nutrientes del agua de riego procedente de la EDAR (febrero 2016).

Parámetro / Nutriente	Análisis del agua de riego
pH	7,75
Conductividad (dS·m ⁻¹)	1,32
	mg·L⁻¹
Na ⁺	169,78
K ⁺	28,05
Ca ²⁺	58,43
Mg ²⁺	20,14
NH ₄ ⁺	13,58
Cl ⁻	203,30
SO ₄ ²⁻	128,29
HCO ₃ ⁻	288,48
NO ₃ ⁻	9,53
PO ₄ ³⁻	1,27

Tabla S2.

Tabla con el porcentaje de peso fresco de los vegetales estudiados en los diferentes estados de crecimiento.

	23/02/16	01/03/16	10/03/16	16/03/16	21/03/16
Brócoli var. Parthenon	94,21 ± 0,17	92,55 ± 1,58	96,17 ± 0,52	95,68 ± 0,16	95,80 ± 0,17
Lechuga Mini Romana var. Jaberá	95,27 ± 0,45	93,74 ± 0,28	94,44 ± 1,25	95,70 ± 0,95	95,40 ± 0,99
Calabacín var. Black Star ^b	95,23 ± 0,44	92,35 ± 0,08	94,77 ± 0,45	95,09 ± 0,18	94,89 ± 0,15
Perejil var. Parsley	90,21 ± 1,19	86,73 ± 0,14	88,15 ± 0,26	86,60 ± 0,79	86,06 ± 0,08
Col Picuda var. Duchy	90,89 ± 0,38	86,35 ± 1,48	93,13 ± 0,37	91,95 ± 0,42	91,80 ± 0,27

Tabla S3.

Límites de detección y cuantificación de los CEs estudiados en la EDAR.

CE	LOD (ng L ⁻¹)	LOQ (ng L ⁻¹)
CBZ	1	4
DCF	10	80
IBP	60	400
KTP	20	30
NPX	30	200

Tabla S4.

Límites de detección y cuantificación de los CEs en hojas y raíces de los vegetales estudiados.

CE	Tejido vegetal ^a	LOD (ng L ⁻¹)	LOQ (ng L ⁻¹)
CBZ	Raíces	0,05	8,02
	Hojas	0,10	9,01
DCF	Raíces	0,78	7,78
	Hojas	0,91	5,98
IBP	Raíces	1,89	4,08
	Hojas	1,94	5,02
KTP	Raíces	0,05	1,22
	Hojas	0,09	0,91
NPX	Raíces	1,19	4,27
	Hojas	1,25	5,90

^a Peso seco.

ANEXO II: DATOS DEL SEGUNDO EXPERIMENTO.

Tabla S5.

Análisis de nutrientes del agua de riego procedente de la EDAR (agosto 2016).

Parámetro / Nutriente	Análisis del agua de riego
pH	7,56
Conductividad (dS·m ⁻¹)	1,25
	mg·L⁻¹
Na ⁺	215,36
K ⁺	33,61
Ca ²⁺	46,71
Mg ²⁺	15,01
NH ₄ ⁺	5,72
Cl ⁻	252,22
SO ₄ ²⁻	75,93
HCO ₃ ⁻	258,24
NO ₃ ⁻	7,20
PO ₄ ³⁻	3,31

Tabla S6.

Tabla con el porcentaje de peso fresco de las tres variedades de lechugas estudiadas en los diferentes estados de crecimiento.

	03/08/16	11/08/16	19/08/16	23/08/16
Lechuga Iceberg var. Gitana ^a	90,69 ± 0,57	91,32 ± 0,41	89,35 ± 0,19	89,55 ± 0,79
Lechuga Mini Romana var. Jabera	92,48 ± 0,78	95,08 ± 0,41	94,10 ± 0,47	93,01 ± 0,38
Lechuga Hoja de Roble var. Kiprien ^b	88,70 ± 3,66	94,13 ± 0,35	93,89 ± 0,37	93,39 ± 0,24

Tabla S7.

Tabla con los coeficientes de regresión lineal entre la dosis aplicada de CEs y la concentración encontrada en el tejido vegetal de cada variedad de lechuga.

Variedad de lechuga	Tejido vegetal	CE	Coefficientes	R ²	p-valor
Lechuga Iceberg	Raíces	CBZ	3,501	0,987	2,00E-04
		DCF	2,307	0,980	9,76E-05
	Hojas	CBZ	6,258	0,982	6,00E-04
		DCF	0,380	0,975	0,001
Lechuga Mini Romana	Raíces	CBZ	2,930	0,954	0,002
		DCF	2,340	0,987	3,00E-05
	Hojas	CBZ	6,842	0,980	7,00E-04
		DCF	0,424	0,965	0,001
Lechuga Hoja de Roble	Raíces	CBZ	2,936	0,974	0,001
		DCF	2,284	0,985	8,65E-05
	Hojas	CBZ	6,409	0,980	3,95E-06
		DCF	0,394	0,975	0,001

Tabla S8.

Tabla con los resultados de los valores medios y el error estandar en el segundo experimento en los tejidos vegetales en las tres variedades de lechuga.

		Concentración de CBZ (ng g ⁻¹) en lechuga			
Concentración de CBZ (µg L ⁻¹)		30	60	120	210
Iceberg					
	Raíces	145,50 ± 0,32	267,57 ± 7,28	465,50 ± 19,16	750,67 ± 24,26
	Hojas	286,50 ± 8,37	520,47 ± 24,98	870,40 ± 27,60	1350,37 ± 33,20
Mini-Romana					
	Raíces	168,27 ± 6,14	275,80 ± 5,60	452,73 ± 11,52	640,23 ± 18,55
	Hojas	352,67 ± 10,57	495,33 ± 17,70	990,60 ± 37,84	1456,60 ± 63,60
Hoja de Roble					
	Raíces	169,67 ± 5,62	256,63 ± 9,86	410,57 ± 11,51	650,50 ± 21,91
	Hojas	215,23 ± 8,00	412,10 ± 16,19	790,20 ± 24,33	1355,30 ± 41,94
		Concentración de DCF (ng g ⁻¹) en lechuga			
Concentración de DCF (µg L ⁻¹)		30	60	120	210
Iceberg					
	Raíces	95,50 ± 5,34	168,57 ± 8,81	295,47 ± 13,45	496,40 ± 26,40
	Hojas	0	14,40 ± 1,79	40,57 ± 2,70	75,73 ± 3,80
Mini-Romana					
	Raíces	92,90 ± 5,76	145,20 ± 5,98	290,30 ± 14,06	501,40 ± 18,11
	Hojas	0	18,60 ± 1,00	52,13 ± 1,94	82,10 ± 4,23
Hoja de Roble					
	Raíces	98,40 ± 6,15	156,87 ± 9,17	295,63 ± 12,97	490,47 ± 27,42
	Hojas	0	21,60 ± 1,73	45,00 ± 2,23	78,07 ± 2,81

Tabla S9.

Tabla con los factores de bioconcentración (BCFs) en el segundo experimento en los tejidos vegetales en las tres variedades de lechuga.

Concentración de CE ($\mu\text{g L}^{-1}$)	CBZ BCF (L kg^{-1})				DCF BCF (L kg^{-1})			
	30	60	120	210	30	60	120	210
Lechuga Iceberg								
Raíces	0,37	0,34	0,30	0,27	0,24	0,22	0,19	0,18
Hojas	0,73	0,67	0,56	0,49	0	0,02	0,03	0,03
Lechuga Mini-Romana								
Raíces	0,43	0,35	0,29	0,23	0,24	0,19	0,19	0,18
Hojas	0,83	0,63	0,63	0,53	0	0,02	0,03	0,03
Lechuga Hoja de Roble								
Raíces	0,43	0,33	0,26	0,24	0,25	0,20	0,19	0,18
Hojas	0,55	0,53	0,51	0,50	0	0,03	0,03	0,03

Tabla S10.

Tabla con la concentración de CEs retenidos en el sustrato de fibra de coco.

Concentración en agua ($\mu\text{g L}^{-1}$)		Concentración de CE retenido en el sustrato (ng g^{-1})			
		30	60	120	210
Iceberg	CBZ	85,25	215,40	342,30	550,50
Mini-Romana	CBZ	68,45	189,40	280,75	475,60
Hoja de Roble	CBZ	110,30	287,00	410,55	670,40
Iceberg	DCF	35,20	98,65	210,80	325,00
Mini-Romana	DCF	45,30	135,70	295,70	425,55
Hoja de Roble	DCF	48,60	115,80	256,45	458,30
Mini-Romana	IBP	20,05	45,10	85,02	127,42
Mini-Romana	KTP	17,65	48,36	83,55	145,20
Mini-Romana	NPX	12,54	28,92	47,44	95,62

ANEXO III: LISTADOS DE CÁLCULO DEL MODELO DE SIMULACIÓN NPUM.

CBZ en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	119,5	ng/g dw
C Leaves	230,7	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral
Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	85	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,39E-02	mg/kg
C leaf	4,61E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
----------	----------	--

Phloem to xylem

KPhXy L/L	8,18E-01	
-----------	----------	--

fn in cytosol, leaves	6,38E-02	
-----------------------	----------	--

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	85	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,085	mg/kg
Kd	2,8	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,43E-03	mg/L water

252 CAPÍTULO X: ANEXOS

CBZ en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.

Lechuga Iceberg var. Gitana.

C Roots	192,3	ng/g dw
C Leaves	371,1	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	215	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,85E-02	mg/kg
C leaf	7,42E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	215	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,215	mg/kg
Kd	3,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,91E-03	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	475,5	ng/g dw
C Leaves	917,8	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	342	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	9,51E-02	mg/kg
C leaf	1,84E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	342	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,342	mg/kg
Kd	2,9	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	9,68E-03	mg/L water

**CBZ en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.
Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	899,1	ng/g dw
C Leaves	1735,5	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	550	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,80E-01	mg/kg
C leaf	3,47E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	550	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,55	mg/kg
Kd	2,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,83E-02	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	146,4	ng/g dw
C Leaves	282,6	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	68	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,93E-02	mg/kg
C leaf	5,65E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	68	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,068	mg/kg
Kd	2,3	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,98E-03	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	216,8	ng/g dw
C Leaves	418,4	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	189	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	4,34E-02	mg/kg
C leaf	8,37E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	189	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,189	mg/kg
Kd	3,2	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	4,41E-03	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	570,6	ng/g dw
C Leaves	1101,4	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	280	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,14E-01	mg/kg
C leaf	2,20E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	280	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,28	mg/kg
Kd	2,3	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,16E-02	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	1027,0	ng/g dw
C Leaves	1982,3	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	475	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,05E-01	mg/kg
C leaf	3,96E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	475	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,475	mg/kg
Kd	2,3	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,09E-02	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	94,1	ng/g dw
C Leaves	181,6	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	110	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,88E-02	mg/kg
C leaf	3,63E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	110	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,11	mg/kg
Kd	3,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,91E-03	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	146,4	ng/g dw
C Leaves	282,6	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	287	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,93E-02	mg/kg
C leaf	5,65E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	287	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,287	mg/kg
Kd	4,8	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,98E-03	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	402,0	ng/g dw
C Leaves	776,0	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	410	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	8,04E-02	mg/kg
C leaf	1,55E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	410	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,41	mg/kg
Kd	3,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,18E-03	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	749,8	ng/g dw
C Leaves	1447,3	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	670	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,50E-01	mg/kg
C leaf	2,89E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	670	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,67	mg/kg
Kd	3,2	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,53E-02	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	128,1	ng/g dw
C Leaves	12,8	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	35	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,56E-02	mg/kg
C leaf	2,56E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	35	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,035	mg/kg
Kd	1,2	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	5,29E-03	mg/L water

**DCF en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.
Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	192,7	ng/g dw
C Leaves	19,3	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	98	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,85E-02	mg/kg
C leaf	3,86E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	98	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,098	mg/kg
Kd	1,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	7,96E-03	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	362,9	ng/g dw
C Leaves	36,3	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	210	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	7,26E-02	mg/kg
C leaf	7,27E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	210	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,21	mg/kg
Kd	1,8	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,50E-02	mg/L water

**DCF en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.
Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	706,6	ng/g dw
C Leaves	70,7	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	325	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,41E-01	mg/kg
C leaf	1,41E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	325	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,325	mg/kg
Kd	1,5	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,92E-02	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jaberá.**

C Roots	103,7	ng/g dw
C Leaves	10,4	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	45	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,07E-02	mg/kg
C leaf	2,08E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	45	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,045	mg/kg
Kd	1,5	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	4,29E-03	mg/L water

**DCF en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.
Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	145,2	ng/g dw
C Leaves	14,5	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	135	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,90E-02	mg/kg
C leaf	2,91E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	135	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,135	mg/kg
Kd	2,3	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	6,00E-03	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	268,0	ng/g dw
C Leaves	26,8	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	295	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	5,36E-02	mg/kg
C leaf	5,37E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	295	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,295	mg/kg
Kd	2,5	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,11E-02	mg/L water

**DCF en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.
Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	558,6	ng/g dw
C Leaves	55,9	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	425	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,12E-01	mg/kg
C leaf	1,12E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	425	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,425	mg/kg
Kd	2,0	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,31E-02	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	98,1	ng/g dw
C Leaves	9,8	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	48	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,96E-02	mg/kg
C leaf	1,96E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	48	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,048	mg/kg
Kd	1,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	4,05E-03	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	167,5	ng/g dw
C Leaves	16,8	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	115	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,35E-02	mg/kg
C leaf	3,35E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	115	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,115	mg/kg
Kd	1,9	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	6,92E-03	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	304,5	ng/g dw
C Leaves	30,5	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	256	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	6,09E-02	mg/kg
C leaf	6,10E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	256	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,256	mg/kg
Kd	2,1	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,26E-02	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	522,5	ng/g dw
C Leaves	52,3	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	458	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,05E-01	mg/kg
C leaf	1,05E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	2,77E-03	
K Root to xylem L/kg	3,61E+02	

K LW L/L	5,31E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	2,88E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	458	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,458	mg/kg
Kd	2,2	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,16E-02	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	81,60	ng/g dw
C Leaves	3,40	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	20,05	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,21E-02	mg/kg
C leaf	3,18E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	20,05	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,02005	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,17E-03	mg/L water

**IBP en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.
Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	149,60	ng/g dw
C Leaves	6,20	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	45,1	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,22E-02	mg/kg
C leaf	5,83E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	45,1	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,0451	mg/kg
Kd	0,8	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,50E-02	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	312,70	ng/g dw
C Leaves	12,90	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	85,02	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	4,64E-02	mg/kg
C leaf	1,22E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	85,02	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,08502	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,13E-02	mg/L water

**IBP en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.
Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	612,30	ng/g dw
C Leaves	25,20	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	127,42	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	9,08E-02	mg/kg
C leaf	2,39E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	127,42	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,12742	mg/kg
Kd	0,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	6,13E-02	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	101,80	ng/g dw
C Leaves	4,10	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	20,05	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,21E-02	mg/kg
C leaf	3,18E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	20,05	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,02005	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,17E-03	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	186,70	ng/g dw
C Leaves	7,50	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	45,1	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,22E-02	mg/kg
C leaf	5,83E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	45,1	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,0451	mg/kg
Kd	0,8	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,50E-02	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	390,20	ng/g dw
C Leaves	15,60	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	85,02	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	4,64E-02	mg/kg
C leaf	1,22E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	85,02	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,08502	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,13E-02	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabeira.**

C Roots	764,00	ng/g dw
C Leaves	30,60	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	127,42	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	9,08E-02	mg/kg
C leaf	2,39E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	127,42	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,12742	mg/kg
Kd	0,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	6,13E-02	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	92,30	ng/g dw
C Leaves	3,80	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	20,05	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,21E-02	mg/kg
C leaf	3,18E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	20,05	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,02005	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,17E-03	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	169,30	ng/g dw
C Leaves	6,90	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	45,1	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,22E-02	mg/kg
C leaf	5,83E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	45,1	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,0451	mg/kg
Kd	0,8	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,50E-02	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	353,90	ng/g dw
C Leaves	14,50	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	85,02	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	4,64E-02	mg/kg
C leaf	1,22E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	85,02	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,08502	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,13E-02	mg/L water

IBP en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	692,80	ng/g dw
C Leaves	28,40	ng/g dw
Chemical input data	Ibuprofen	
log Kow	3,5	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	127,42	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	9,08E-02	mg/kg
C leaf	2,39E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	7,29E-05	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	2,07E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,155	
Kxy/root kg/L	7,49E-02	
K Root to xylem L/kg	1,34E+01	

K LW L/L	2,07E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,10E-01	
fn in cytosol, leaves	5,67E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	127,42	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,12742	mg/kg
Kd	0,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	6,13E-02	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	68,50	ng/g dw
C Leaves	11,70	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	17,65	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,51E-02	mg/kg
C leaf	2,36E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	17,65	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,01765	mg/kg
Kd	0,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,95E-03	mg/L water

**KTP en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.
Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	108,70	ng/g dw
C Leaves	18,50	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	48,36	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	5,57E-02	mg/kg
C leaf	3,75E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	48,36	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,04836	mg/kg
Kd	0,8	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,42E-02	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	242,70	ng/g dw
C Leaves	41,30	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	83,55	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,24E-01	mg/kg
C leaf	8,37E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	83,55	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,08355	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,17E-02	mg/L water

**KTP en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.
Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	426,90	ng/g dw
C Leaves	72,60	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	145,2	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,19E-01	mg/kg
C leaf	1,47E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	145,2	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,1452	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	5,58E-02	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	93,80	ng/g dw
C Leaves	13,40	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	17,65	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,51E-02	mg/kg
C leaf	2,36E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	17,65	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,01765	mg/kg
Kd	0,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,95E-03	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	148,90	ng/g dw
C Leaves	21,40	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	48,36	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	5,57E-02	mg/kg
C leaf	3,75E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	48,36	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,04836	mg/kg
Kd	0,8	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,42E-02	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jibera.**

C Roots	332,20	ng/g dw
C Leaves	47,70	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	83,55	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,24E-01	mg/kg
C leaf	8,37E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	83,55	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,08355	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,17E-02	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	584,40	ng/g dw
C Leaves	83,80	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	145,2	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,19E-01	mg/kg
C leaf	1,47E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	145,2	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,1452	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	5,58E-02	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	81,00	ng/g dw
C Leaves	13,40	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	17,65	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,51E-02	mg/kg
C leaf	2,36E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	17,65	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,01765	mg/kg
Kd	0,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,95E-03	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	128,60	ng/g dw
C Leaves	21,30	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	48,36	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	5,57E-02	mg/kg
C leaf	3,75E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	48,36	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,04836	mg/kg
Kd	0,8	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,42E-02	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	287,10	ng/g dw
C Leaves	47,50	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	83,55	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,24E-01	mg/kg
C leaf	8,37E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	83,55	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,08355	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,17E-02	mg/L water

**KTP en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.
Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	505,00	ng/g dw
C Leaves	83,50	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	145,2	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,19E-01	mg/kg
C leaf	1,47E-01	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,182	
Kxy/root kg/L	1,87E-02	
K Root to xylem L/kg	5,35E+01	

K LW L/L	9,75E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,30E-02	
fn in cytosol, leaves	7,41E-06	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	145,2	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,1452	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	5,58E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	217,90	ng/g dw
C Leaves	7,30	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	12,54	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	12,54	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,01254	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

**NPX en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.
Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	397,60	ng/g dw
C Leaves	13,40	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	28,92	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	28,92	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,02892	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	902,10	ng/g dw
C Leaves	30,40	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	47,44	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	47,44	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,04744	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.**Lechuga Iceberg var. Gitana.**

C Roots	1444,30	ng/g dw
C Leaves	48,60	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	95,62	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,270	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	95,62	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,09562	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	320,00	ng/g dw
C Leaves	9,70	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	12,54	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	12,54	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,01254	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	584,10	ng/g dw
C Leaves	17,80	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	28,92	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	28,92	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,02892	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	1325,10	ng/g dw
C Leaves	40,30	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	47,44	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	47,44	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,04744	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	2121,60	ng/g dw
C Leaves	64,50	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	95,62	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	95,62	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,09562	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 30 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	268,60	ng/g dw
C Leaves	8,90	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	12,54	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	30	microg/L
Concentration at coconut fibre	12,54	ng/g
Concentration in irrigation water	0,03	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,01254	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 60 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	490,20	ng/g dw
C Leaves	16,20	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	28,92	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	60	microg/L
Concentration at coconut fibre	28,92	ng/g
Concentration in irrigation water	0,06	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,02892	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 120 µg/l.**Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	1112,10	ng/g dw
C Leaves	36,80	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	47,44	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	120	microg/L
Concentration at coconut fibre	47,44	ng/g
Concentration in irrigation water	0,12	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,04744	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

**NPX en agua de riego a una concentración de 210 µg/l.
Lechuga Hoja de roble var. Kiprien.**

C Roots	1780,60	ng/g dw
C Leaves	59,00	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	95,62	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,80E-02	mg/kg
C leaf	2,15E-02	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,210	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00	
KXyW xylem to water L/L	0,147	
Kxy/root kg/L	1,58E-02	
K Root to xylem L/kg	6,34E+01	

K LW L/L	9,33E+00	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	1,26E-01	
fn in cytosol, leaves	1,64E-05	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	210	microg/L
Concentration at coconut fibre	95,62	ng/g
Concentration in irrigation water	0,21	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,09562	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,12E-02	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 11,87 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	40,07	ng/g dw
C Leaves	77,30	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	11,87	microg/L
Concentration at coconut fibre	29,78	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,06E-02 mg/kg
C leaf	2,04E-02 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170 1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06 1/d
Leaves all loss	1,23E-01 1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01
KXyW xylem to water L/L	0,993
Kxy/root kg/L	6,34E-02
K Root to xylem L/kg	1,58E+01

K LW L/L	1,57E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,18E-01
fn in cytosol, leaves	6,38E-02

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	11,87 microg/L
Concentration at coconut fibre	29,78 ng/g
Concentration in irrigation water	0,01187 mg/L
Concentration at coconut fibre	0,02978 mg/kg
Kd	2,5 L/kg
volume water per pot	0,5 L
weight coconut fibre per pot	2,0 kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,08E-03 mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 10,37 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	34,70	ng/g dw
C Leaves	67,03	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	10,37	microg/L
Concentration at coconut fibre	27,56	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	8,76E-03 mg/kg
C leaf	1,69E-02 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01
KXyW xylem to water L/L	0,993
Kxy/root kg/L	6,34E-02
K Root to xylem L/kg	1,58E+01

K LW L/L	1,57E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,18E-01
fn in cytosol, leaves	6,38E-02

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	10,37	microg/L
Concentration at coconut fibre	27,56	ng/g
Concentration in irrigation water	0,01037	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,02756	mg/kg
Kd	2,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,92E-04	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 1,45 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	7,67	ng/g dw
C Leaves	14,73	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	1,45	microg/L
Concentration at coconut fibre	2,25	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,98E-03 mg/kg
C leaf	3,82E-03 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01
KXyW xylem to water L/L	0,993
Kxy/root kg/L	6,34E-02
K Root to xylem L/kg	1,58E+01

K LW L/L	1,57E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,18E-01
fn in cytosol, leaves	6,38E-02

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	1,45	microg/L
Concentration at coconut fibre	2,25	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00145	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00225	mg/kg
Kd	1,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,01E-04	mg/L water

**CBZ en agua de riego a una concentración de 2,47 µg/l.
Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	10,97	ng/g dw
C Leaves	21,13	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	2,47	microg/L
Concentration at coconut fibre	4,95	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,69E-03 mg/kg
C leaf	5,20E-03 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170 1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06 1/d
Leaves all loss	1,23E-01 1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01
KXyW xylem to water L/L	0,993
Kxy/root kg/L	6,34E-02
K Root to xylem L/kg	1,58E+01

K LW L/L	1,57E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,18E-01
fn in cytosol, leaves	6,38E-02

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	2,47 microg/L
Concentration at coconut fibre	4,95 ng/g
Concentration in irrigation water	0,00247 mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00495 mg/kg
Kd	2,0 L/kg
volume water per pot	0,5 L
weight coconut fibre per pot	2,0 kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,74E-04 mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 2,40 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jaberá.**

C Roots	11,17	ng/g dw
C Leaves	21,15	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	2,4	microg/L
Concentration at coconut fibre	4,7	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,67E-03	mg/kg
C leaf	5,15E-03	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root		
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01	
KXyW xylem to water L/L	0,993	
Kxy/root kg/L	6,34E-02	
K Root to xylem L/kg	1,58E+01	

K LW L/L	1,57E+01	
Phloem to xylem		
KPhXy L/L	8,18E-01	
fn in cytosol, leaves	6,38E-02	

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09	
-------------	----------	--

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	2,4	microg/L
Concentration at coconut fibre	4,7	ng/g
Concentration in irrigation water	0,0024	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,0047	mg/kg
Kd	2,0	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,72E-04	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 14,10 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	47,83	ng/g dw
C Leaves	92,33	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	14,1	microg/L
Concentration at coconut fibre	35,65	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,25E-02 mg/kg
C leaf	2,41E-02 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01
KXyW xylem to water L/L	0,993
Kxy/root kg/L	6,34E-02
K Root to xylem L/kg	1,58E+01

K LW L/L	1,57E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,18E-01
fn in cytosol, leaves	6,38E-02

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	14,1	microg/L
Concentration at coconut fibre	35,65	ng/g
Concentration in irrigation water	0,0141	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,03565	mg/kg
Kd	2,5	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,27E-03	mg/L water

CBZ en agua de riego a una concentración de 2,02 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	10,30	ng/g dw
C Leaves	19,90	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	2,02	microg/L
Concentration at coconut fibre	3,5	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,50E-03 mg/kg
C leaf	4,83E-03 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170 1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06 1/d
Leaves all loss	1,23E-01 1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01
KXyW xylem to water L/L	0,993
Kxy/root kg/L	6,34E-02
K Root to xylem L/kg	1,58E+01

K LW L/L	1,57E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,18E-01
fn in cytosol, leaves	6,38E-02

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	2,02 microg/L
Concentration at coconut fibre	3,5 ng/g
Concentration in irrigation water	0,00202 mg/L
Concentration at coconut fibre	0,0035 mg/kg
Kd	1,7 L/kg
volume water per pot	0,5 L
weight coconut fibre per pot	2,0 kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,55E-04 mg/L water

**CBZ en agua de riego a una concentración de 6,22 µg/l.
Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	21,93	ng/g dw
C Leaves	42,37	ng/g dw
Chemical input data	Carbamazepine	
log Kow	2,23	of neutral

Concentration in irrigation water	6,22	microg/L
Concentration at coconut fibre	13,54	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	6,30E-03 mg/kg
C leaf	1,22E-02 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,76E-06	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	1,57E+01
KXyW xylem to water L/L	0,993
Kxy/root kg/L	6,34E-02
K Root to xylem L/kg	1,58E+01

K LW L/L	1,57E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,18E-01
fn in cytosol, leaves	6,38E-02

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	6,22	microg/L
Concentration at coconut fibre	13,54	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00622	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,01354	mg/kg
Kd	2,2	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	6,41E-04	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 0,39 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	0,77	ng/g dw
C Leaves	0,10	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	0,39	microg/L
Concentration at coconut fibre	1,4	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,23E-04 mg/kg
C leaf	1,23E-05 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01
KXyW xylem to water L/L	0,147
Kxy/root kg/L	2,77E-03
K Root to xylem L/kg	3,61E+02

K LW L/L	5,31E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	1,26E-01
fn in cytosol, leaves	2,88E-06

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	0,39	microg/L
Concentration at coconut fibre	1,4	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00039	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,0014	mg/kg
Kd	3,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,54E-05	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 0,53 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	0,97	ng/g dw
C Leaves	0,10	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	0,53	microg/L
Concentration at coconut fibre	1,98	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,61E-04	mg/kg
C leaf	1,61E-05	fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01
KXyW xylem to water L/L	0,147
Kxy/root kg/L	2,77E-03
K Root to xylem L/kg	3,61E+02

K LW L/L	5,31E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	1,26E-01
fn in cytosol, leaves	2,88E-06

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	0,53	microg/L
Concentration at coconut fibre	1,98	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00053	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00198	mg/kg
Kd	3,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,32E-05	mg/L water

DCF en agua de riego a una concentración de 0,38 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	1,13	ng/g dw
C Leaves	0,13	ng/g dw
Chemical input data	Diclofenac	
log Kow	4,5	of neutral

Concentration in irrigation water	0,38	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,95	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,67E-04 mg/kg
C leaf	1,67E-05 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	4,57E-12	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	5,31E+01
KXyW xylem to water L/L	0,147
Kxy/root kg/L	2,77E-03
K Root to xylem L/kg	3,61E+02

K LW L/L	5,31E+01
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	1,26E-01
fn in cytosol, leaves	2,88E-06

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	0,38	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,95	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00038	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00095	mg/kg
Kd	2,5	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,45E-05	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 0,67 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	1,9	ng/g dw
C Leaves	0,3	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	0,67	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,45	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	7,13E-04 mg/kg
C leaf	4,80E-04 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00
KXyW xylem to water L/L	0,182
Kxy/root kg/L	1,87E-02
K Root to xylem L/kg	5,35E+01

K LW L/L	9,75E+00
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,30E-02
fn in cytosol, leaves	7,41E-06

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	0,67	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,45	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00067	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00045	mg/kg
Kd	0,7	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,82E-04	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 1,39 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	0,5	ng/g dw
C Leaves	0,3	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	1,39	microg/L
Concentration at coconut fibre	1,1	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,31E-03 mg/kg
C leaf	8,81E-04 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170 1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10 1/d
Leaves all loss	1,23E-01 1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00
KXyW xylem to water L/L	0,182
Kxy/root kg/L	1,87E-02
K Root to xylem L/kg	5,35E+01

K LW L/L	9,75E+00
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,30E-02
fn in cytosol, leaves	7,41E-06

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	1,39 microg/L
Concentration at coconut fibre	1,1 ng/g
Concentration in irrigation water	0,00139 mg/L
Concentration at coconut fibre	0,0011 mg/kg
Kd	0,8 L/kg
volume water per pot	0,5 L
weight coconut fibre per pot	2,0 kg
Cw in the pot with cocosfibras	3,34E-04 mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 0,34 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	0,8	ng/g dw
C Leaves	0,1	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	0,34	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,29	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,02E-04 mg/kg
C leaf	2,03E-04 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00
KXyW xylem to water L/L	0,182
Kxy/root kg/L	1,87E-02
K Root to xylem L/kg	5,35E+01

K LW L/L	9,75E+00
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,30E-02
fn in cytosol, leaves	7,41E-06

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	0,34	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,29	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00034	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00029	mg/kg
Kd	0,9	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	7,71E-05	mg/L water

KTP en agua de riego a una concentración de 0,12 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	0,5	ng/g dw
C Leaves	0,1	ng/g dw
Chemical input data	Ketoprofen	
log Kow	3,1	of neutral

Concentration in irrigation water	0,12	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,05	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,77E-04 mg/kg
C leaf	1,19E-04 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170 1/d
Loss to air (fn only)	2,86E-10 1/d
Leaves all loss	1,23E-01 1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	9,75E+00
KXyW xylem to water L/L	0,182
Kxy/root kg/L	1,87E-02
K Root to xylem L/kg	5,35E+01

K LW L/L	9,75E+00
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	8,30E-02
fn in cytosol, leaves	7,41E-06

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	0,12 microg/L
Concentration at coconut fibre	0,05 ng/g
Concentration in irrigation water	0,00012 mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00005 mg/kg
Kd	0,4 L/kg
volume water per pot	0,5 L
weight coconut fibre per pot	2,0 kg
Cw in the pot with cocosfibras	4,50E-05 mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 0,28 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	2,5	ng/g dw
C Leaves	0,1	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	0,28	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,15	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	3,01E-04 mg/kg
C leaf	1,71E-04 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00
KXyW xylem to water L/L	0,147
Kxy/root kg/L	1,58E-02
K Root to xylem L/kg	6,34E+01

K LW L/L	9,33E+00
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	1,26E-01
fn in cytosol, leaves	1,64E-05

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	0,28	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,15	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00028	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00015	mg/kg
Kd	0,5	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,91E-05	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 0,94 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	8,5	ng/g dw
C Leaves	0,3	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	0,94	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,51	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,00E-03 mg/kg
C leaf	5,68E-04 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170 1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08 1/d
Leaves all loss	1,23E-01 1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00
KXyW xylem to water L/L	0,147
Kxy/root kg/L	1,58E-02
K Root to xylem L/kg	6,34E+01

K LW L/L	9,33E+00
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	1,26E-01
fn in cytosol, leaves	1,64E-05

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	0,94 microg/L
Concentration at coconut fibre	0,51 ng/g
Concentration in irrigation water	0,00094 mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00051 mg/kg
Kd	0,5 L/kg
volume water per pot	0,5 L
weight coconut fibre per pot	2,0 kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,97E-04 mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 1,01 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	8,5	ng/g dw
C Leaves	0,3	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	1,01	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,6	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	1,01E-03 mg/kg
C leaf	5,73E-04 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00
KXyW xylem to water L/L	0,147
Kxy/root kg/L	1,58E-02
K Root to xylem L/kg	6,34E+01

K LW L/L	9,33E+00
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	1,26E-01
fn in cytosol, leaves	1,64E-05

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	1,01	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,6	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00101	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,0006	mg/kg
Kd	0,6	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	2,99E-04	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 0,23 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	2,4	ng/g dw
C Leaves	0,1	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral

Concentration in irrigation water	0,23	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,1	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	2,84E-04 mg/kg
C leaf	1,61E-04 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170	1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08	1/d
Leaves all loss	1,23E-01	1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00
KXyW xylem to water L/L	0,147
Kxy/root kg/L	1,58E-02
K Root to xylem L/kg	6,34E+01

K LW L/L	9,33E+00
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	1,26E-01
fn in cytosol, leaves	1,64E-05

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	0,23	microg/L
Concentration at coconut fibre	0,1	ng/g
Concentration in irrigation water	0,00023	mg/L
Concentration at coconut fibre	0,0001	mg/kg
Kd	0,4	L/kg
volume water per pot	0,5	L
weight coconut fibre per pot	2,0	kg
Cw in the pot with cocosfibras	8,40E-05	mg/L water

NPX en agua de riego a una concentración de 3,70 µg/l.**Lechuga Mini Romana var. Jabera.**

C Roots	33,9	ng/g dw
C Leaves	1,0	ng/g dw
Chemical input data	Naproxen	
log Kow	3,2	of neutral
Concentration in irrigation water	3,7	microg/L
Concentration at coconut fibre	1,95	ng/g

Analytical steady-state solution with phloem from leaves to roots

C root	4,03E-03 mg/kg
C leaf	2,28E-03 fresh weight

Calculations

Roots k growth + k metab	0,170 1/d
Loss to air (fn only)	1,06E-08 1/d
Leaves all loss	1,23E-01 1/d

Partition coefficients

Root	
KRW (vac+cyt only) L/L	9,33E+00
KXyW xylem to water L/L	0,147
Kxy/root kg/L	1,58E-02
K Root to xylem L/kg	6,34E+01

K LW L/L	9,33E+00
Phloem to xylem	
KPhXy L/L	1,26E-01
fn in cytosol, leaves	1,64E-05

Permeability related to water (max same)

P water m/s	2,20E-09
-------------	----------

Calculation of concentration in pot

Concentration in irrigation water	3,7 microg/L
Concentration at coconut fibre	1,95 ng/g
Concentration in irrigation water	0,0037 mg/L
Concentration at coconut fibre	0,00195 mg/kg
Kd	0,5 L/kg
volume water per pot	0,5 L
weight coconut fibre per pot	2,0 kg
Cw in the pot with cocosfibras	1,19E-03 mg/L water

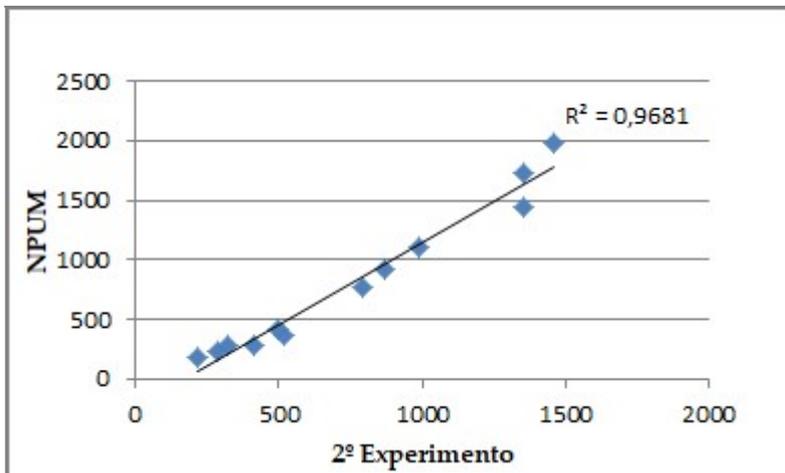
ANEXO IV: COEFICIENTES DE CORRELACIÓN ENTRE EL SEGUNDO EXPERIMENTO Y LOS MODELOS DE PREDICCIÓN UTILIZADOS.

Figura A1. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos en el 2º experimento con CBZ en las hojas de las tres variedades de lechuga estudiadas y en la predicción del modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

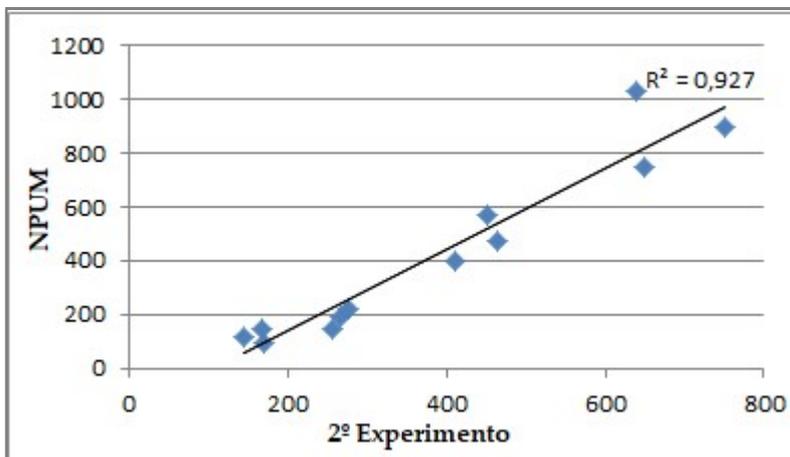


Figura A2. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos en el 2º experimento con CBZ en las raíces de las tres variedades de lechuga estudiadas y en la predicción del modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

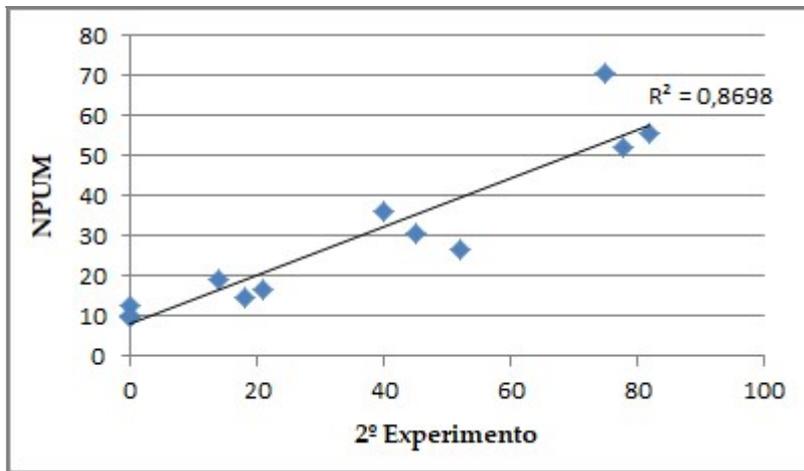


Figura A3. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos en el 2º experimento con DCF en las hojas de las tres variedades de lechuga estudiadas y en la predicción del modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

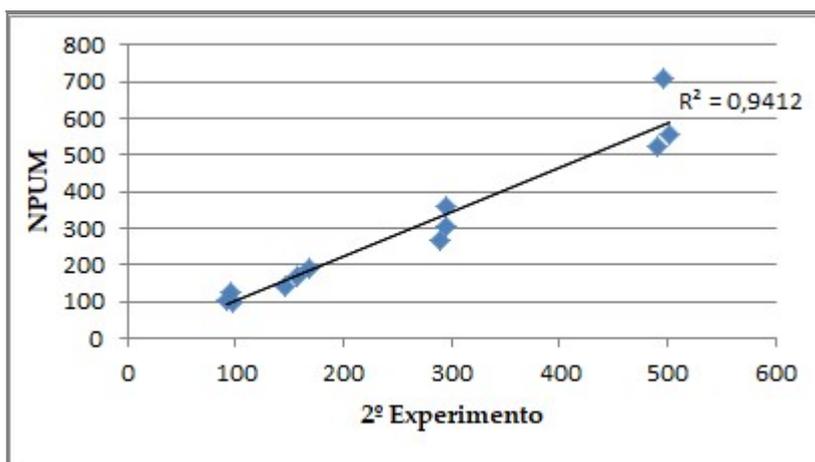


Figura A4. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos en el 2º experimento con DCF en las raíces de las tres variedades de lechuga estudiadas y en la predicción del modelo de simulación NPUM. Fuente: elaboración propia

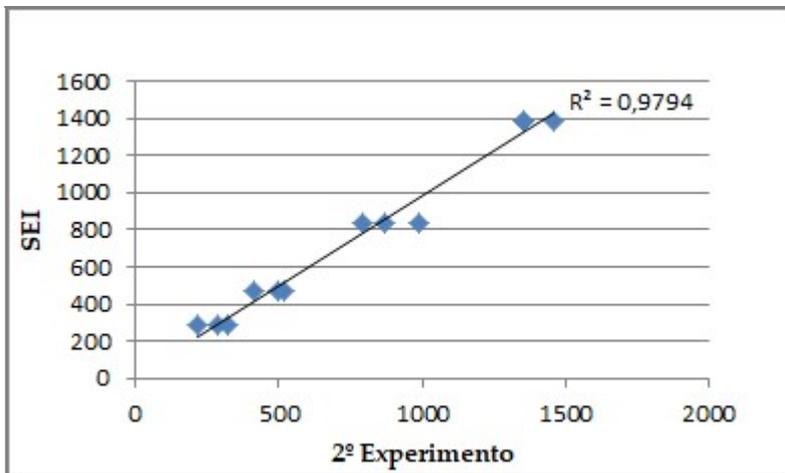


Figura A5. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos en el 2º experimento con CBZ en las hojas de las tres variedades de lechuga estudiadas y en la predicción del modelo de simulación SEI. Fuente: elaboración propia

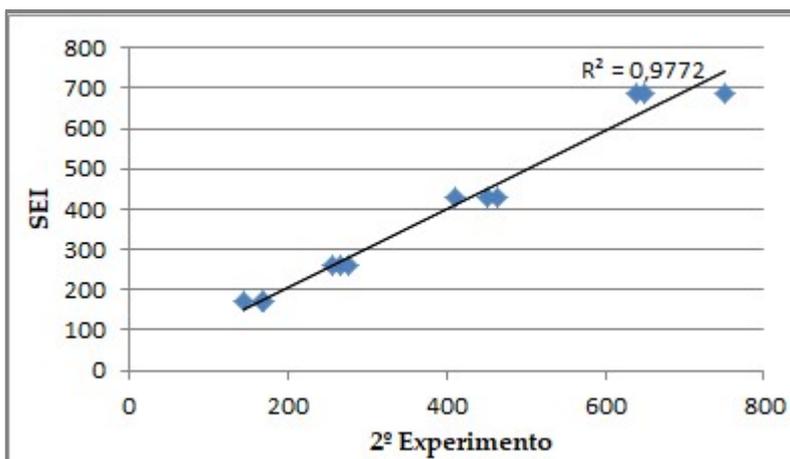


Figura A6. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos en el 2º experimento con CBZ en las raíces de las tres variedades de lechuga estudiadas y en la predicción del modelo de simulación SEI. Fuente: elaboración propia

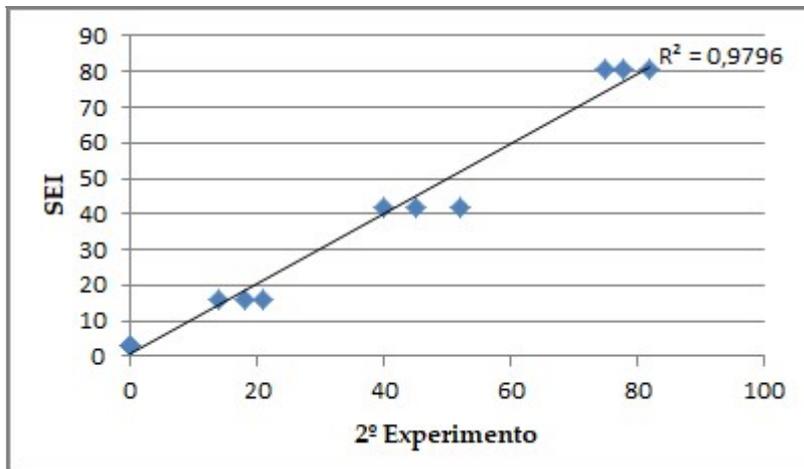


Figura A7. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos en el 2º experimento con DCF en las hojas de las tres variedades de lechuga estudiadas y en la predicción del modelo de simulación SEI. Fuente: elaboración propia

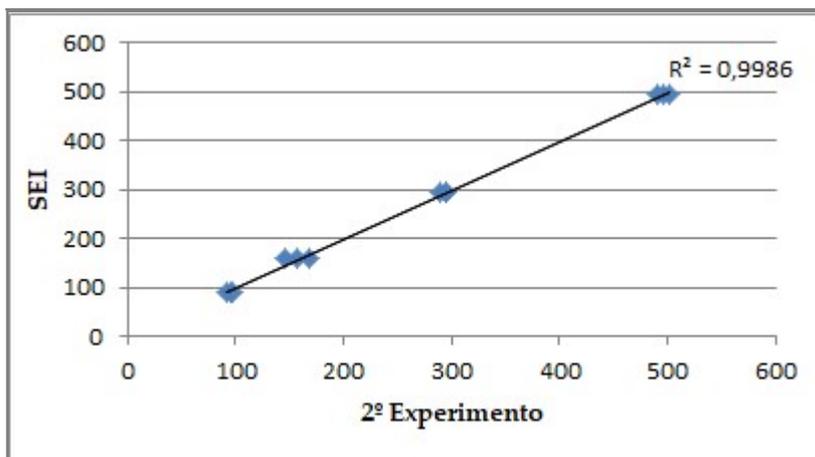


Figura A8. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos en el 2º experimento con DCF en las raíces de las tres variedades de lechuga estudiadas y en la predicción del modelo de simulación SEI. Fuente: elaboración propia

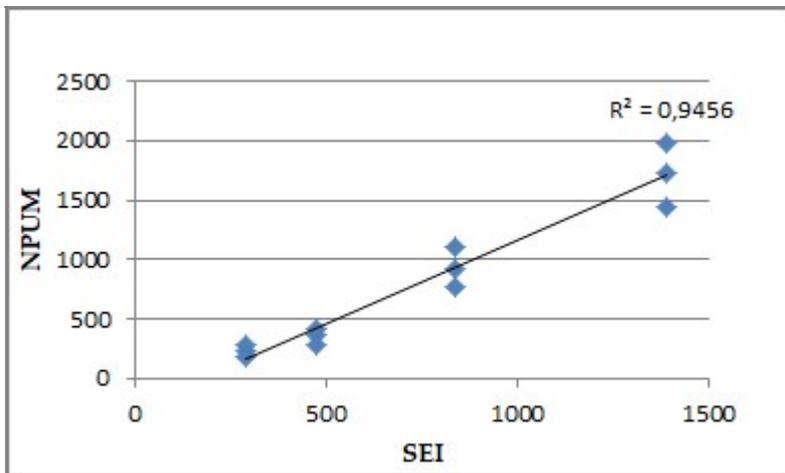


Figura A9. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos de CBZ en las hojas de las tres variedades de lechuga estudiadas con la predicción del modelo de simulación NPUM y en la predicción del modelo de simulación SEI. Fuente: elaboración propia

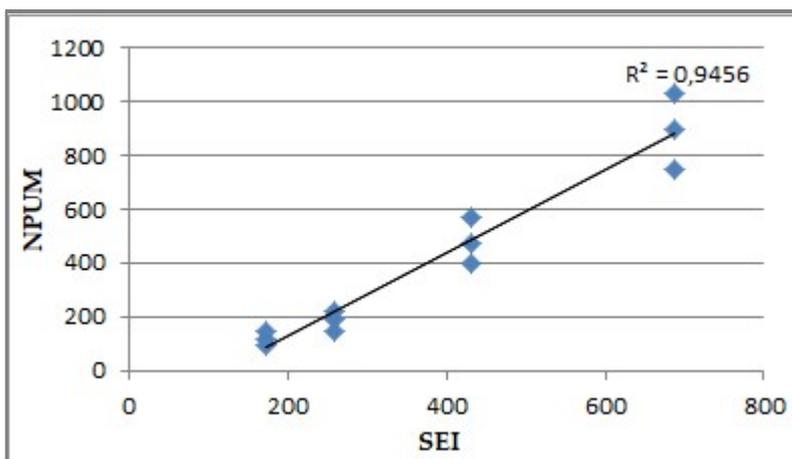


Figura A10. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos de CBZ en las raíces de las tres variedades de lechuga estudiadas con la predicción del modelo de simulación NPUM y en la predicción del modelo de simulación SEI. Fuente: elaboración propia

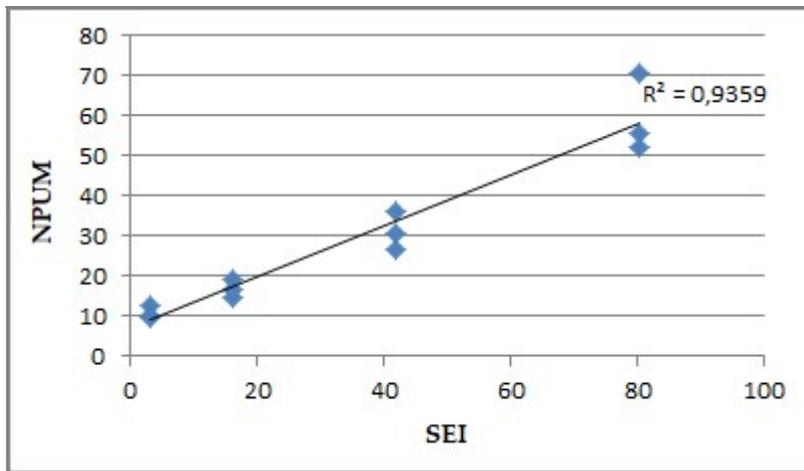


Figura A11. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos de DCF en las raíces de las tres variedades de lechuga estudiadas con la predicción del modelo de simulación NPUM y en la predicción del modelo de simulación SEI. Fuente: elaboración propia

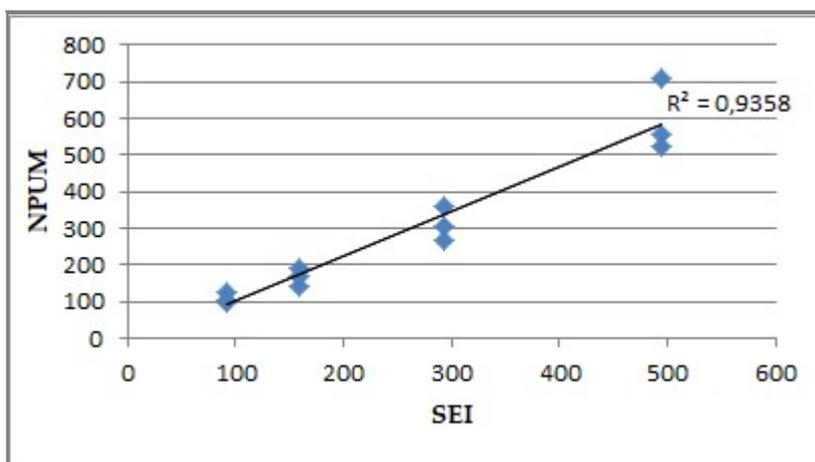


Figura A12. Gráfica de la correlación de los valores obtenidos de DCF en las raíces de las tres variedades de lechuga estudiadas con la predicción del modelo de simulación NPUM y en la predicción del modelo de simulación SEI. Fuente: elaboración propia

