

ANÁLISIS QUIMIOTOPOLÓGICO DE 60 MOLÉCULAS PLAGUICIDAS.

LAURA VALENTINA ROJAS SÁNCHEZ

**UNIVERSIDAD SANTO TOMÁS
FACULTAD DE INGENIERÍA AMBIENTAL
PROGRAMA DE INGENIERÍA AMBIENTAL
BOGOTÁ D.C, COLOMBIA
2021**

ANÁLISIS QUIMIOTOPOLÓGICO DE 60 MOLÉCULAS PLAGUICIDAS.

LAURA VALENTINA ROJAS SÁNCHEZ

TRABAJO DE GRADO PARA OPTAR EL TÍTULO DE INGENIERA AMBIENTAL

DIRECTORA:

EMILBUS AZELLEB URIBE GUERRERO- DOCTORA EN QUÍMICA

CODIRECTOR:

MARIO ALBERTO BARÓN RODRÍGUEZ – DOCTOR EN QUÍMICA

**UNIVERSIDAD SANTO TOMÁS
FACULTAD DE INGENIERÍA AMBIENTAL
PROGRAMA DE INGENIERÍA AMBIENTAL
BOGOTÁ D.C, COLOMBIA
2021**

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
RESUMEN.....	10
INTRODUCCIÓN	11
OBJETIVOS.....	13
OBJETIVO GENERAL	13
OBJETIVOS ESPECÍFICOS	13
ANTECEDENTES.....	14
MARCO TEÓRICO	17
1. ¿Qué son los plaguicidas y cuáles son los tipos de plaguicidas?	17
1.1. Herbicidas.....	17
1.2. Insecticidas.....	17
1.3. Fungicidas.....	17
1.4. Acaricidas.....	17
1.5. Nematicidas.....	17
2. Análisis Quimiotopológico	19
2.1. Selección del conjunto de moléculas y las propiedades que las definen	19
2.2. Homogeneización de las propiedades.....	19
2.3. Análisis de agrupamientos.....	19
2.3.1. Coeficiente de similitud.	19
2.3.1.1. Métrica.....	19
2.3.1.2. No métrica.	20
2.3.2. Metodologías de agrupamiento.....	21
2.3.3. Dendrogramas.....	21
2.3.4. Extracción de los agrupamientos.	22
2.4. Topología.....	24
2.4.1. Propiedades topológicas.....	24
2.4.1.1. Conjunto Clausura	24
2.4.1.2. Conjunto frontera.	24
2.4.1.3. Conjunto interior.	25
METODOLOGÍA	266

1. Selección de las moléculas a estudiar.	26
2. Definir cada una de las moléculas por sus propiedades.	29
3. Normalización de la matriz 15x60.	30
4. Análisis de agrupamiento.	30
5. Extracción de agrupamientos.	31
6. Estudio de las propiedades topológicas.	31
ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	32
1. Análisis de agrupamientos	32
2. Conjuntos clausura, frontera e interior de cada subconjunto.	37
IMPACTO SOCIAL Y HUMANÍSTICO	49
CONCLUSIONES	50
RECOMENDACIONES.....	52
REFERENCIAS	53
ANEXOS.....	59

LISTA DE ANEXOS

	Pág.
ANEXO A. Datos de las propiedades fisicoquímicas	60
□ <i>Propiedades experimentales</i>	60
□ <i>Propiedades teóricas</i>	65
ANEXO B. Datos de las propiedades fisicoquímicas normalizados.....	69
□ <i>Propiedades experimentales</i>	69
□ <i>Propiedades teóricas</i>	72
ANEXO C. Dendrograma con función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento Vecino más lejano.....	75
□ <i>Extracción de los agrupamientos</i>	76
ANEXO D. Dendrograma con función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento centroide	79
□ <i>Extracción de los agrupamientos</i>	80
ANEXO E. Dendrograma con función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento mediana	85
□ <i>Extracción de los agrupamientos</i>	86
ANEXO F. Dendrograma con función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento Ward	90
□ <i>Extracción de agrupamientos</i>	91
ANEXO G. Dendrograma con función de similitud Minkowski y metodología de agrupamiento centroide	94
□ <i>Extracción de agrupamientos</i>	95
ANEXO H. Dendrograma con función de similitud Minkowski y metodología de agrupamiento mediana	99
□ <i>Extracción de agrupamiento</i>	100

ANEXO I. Dendrograma con función de similitud Minkowski y metodología de agrupamiento ward	103
□ <i>Extracción de los agrupamientos</i>	104
ANEXO J. Dendrograma con función de similitud Minkowski y metodología de agrupamiento vecino más lejano	107
□ <i>Extracción de los agrupamientos</i>	108
ANEXO K. Dendrograma con función de similitud Coseno y metodología de agrupamiento centroide	111
□ <i>Extracción de agrupamientos</i>	112
ANEXO L. Dendrograma con función de similitud Coseno y metodología de agrupamiento mediana	115
□ <i>Extracción de agrupamientos</i>	116
ANEXO M. Dendrograma con función de similitud Coseno y metodología de agrupamiento ward	119
□ <i>Extracción de agrupamientos</i>	120
ANEXO N. Dendrograma con función de similitud Coseno y metodología de agrupamiento vecino más lejano	125
□ <i>Extracción de agrupamientos</i>	1266
ANEXO Ñ. Evidencia de someter los resultados a un congreso nacional	129

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Clasificación de plaguicidas según su estructura química y su modo de acción	18
Tabla 2. Clasificación de plaguicidas según la toxicidad aguda	18
Tabla 3. Propiedades fisicoquímicas utilizadas en el estudio	30
Tabla 4. Funciones de similitud y métodos de agrupamiento, utilizados en análisis de agrupamientos.	30
Tabla 5. Comparación entre los resultados obtenidos en este trabajo y los obtenidos por medio de la literatura.....	46

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Distancia Euclidiana.....	20
Figura 2. Vecino más lejano	21
Figura 3. Dendrograma.....	21
Figura 4. Corte de las ramas del dendrograma	22
Figura 5. Número de agrupamientos con su población y cálculo del número de selección.....	23
Figura 6. Base topológica del ejemplo	23
Figura 7. Clausura de A	24
Figura 8. Frontera de A.....	25
Figura 9. Interior de A	25
Figura 10. Conjunto P plaguicidas	26
Figura 11. Formación de Herbicidas (H)	26
Figura 11A. Geometría molecular de cada molécula de Herbicidas (H)	27
Figura 12. Formación de Insecticidas (I) y sus respectivas geometrías moleculares	28
Figura 13. Formación de Fungicidas (F) y sus respectivas geometrías moleculares	28
Figura 14. Formación de Acaricidas (A) y sus respectivas geometrías moleculares	29
Figura 15. Formación de Nematicidas (N) y sus respectivas geometrías moleculares.....	29

Figura 16. Base topológica obtenida con la función de similitud Euclidiana y la metodología de agrupamiento Vecino más lejano.	32
Figura 17. Diagrama de conjuntos	32
Figura 18. Relaciones de todos los subconjuntos.....	33
Figura 19. Subconjunto Herbicidas (H)	38
Figura 20. Subconjunto Insecticidas (I)	40
Figura 21. Subconjunto Fungicidas (F)	42
Figura 22. Subconjunto Acaricidas (A).....	43
Figura 23. Subconjunto Nematicidas (N)	45

RESUMEN

Una de las problemáticas ambientales más significativas a nivel nacional e internacional está relacionada con la contaminación y afectaciones en la salud que genera el uso de plaguicidas. Esto ocurre, en gran medida, porque no se tiene un control racional del manejo, uso e impacto que generan. Se conoce que los agricultores, en algunas ocasiones, prefieren utilizar plaguicidas de bajo costo en sus cultivos sin, probablemente, tener una conciencia de las afectaciones que estas sustancias tienen en el medio ambiente y en la salud poblacional. Teniendo en cuenta que los plaguicidas son sustancias químicas, en este trabajo se hizo uso de la quimiotopología para encontrar relaciones de similitud entre diferentes tipos de estas moléculas plaguicidas buscando así corroborar el reemplazo de unas sustancias por otras de los que se tenga reportes en la literatura o proponiendo nuevas moléculas de reemplazo para pesticidas de uso común. Por tal razón, se seleccionaron 60 plaguicidas definidos cada uno por 15 propiedades fisicoquímicas. Se realizaron 12 análisis de agrupamientos basados en un tratamiento de datos normalizados y haciendo uso de cuatro (4) metodologías de agrupamiento (Centroide, Mediana, Ward y Vecino más lejano) y tres (3) funciones de similitud (Euclidiana, Minkowski y Coseno). Del análisis de agrupamiento se obtuvieron 12 dendrogramas. Teniendo en cuenta que los agrupamientos obtenidos en todos los dendrogramas son similares, se seleccionó el dendrograma obtenido con la función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento Vecino más lejano para continuar con el análisis. Después de obtener la base topológica se estudiaron las propiedades clausura, frontera e interior de los 5 subconjuntos: Herbicidas, Insecticidas, Fungicidas, Acaricidas y Nematicidas. Como resultado, se confirmaron relaciones de similitud reportadas previamente en estudios experimentales y se sugieren nuevas relaciones para estudiar. También, se encontró que ninguna clasificación de plaguicidas es robusta y que existen relaciones entre unos y otros de los diferentes subconjuntos aquí estudiados.

Palabras claves: quimiotopología, análisis de agrupamiento, dendrograma, relaciones de similitudes, plaguicidas.

INTRODUCCIÓN

Las sustancias químicas pueden ser sólidas, líquidas, gaseosas, coloridas e incoloras (Istas, s.f.). El comportamiento químico de cada una de las sustancias ha permitido clasificarlas en elementos y compuestos, y actualmente se conoce que entre estos existen relaciones químicas dadas principalmente por una red de reacciones químicas. En el subconjunto de los compuestos que está inmerso dentro del conjunto de las sustancias químicas se encuentran los aldehídos, las cetonas, los ésteres, los alcanos, alquenos, los óxidos, los hidruros, entre otros (Uribe, Ramírez & Trujillo, 2020) y los plaguicidas que son las moléculas consideradas en este estudio.

Los plaguicidas son sustancias químicas mezcladas entre sí con el fin de prevenir, controlar y destruir las plagas que generan daños en la producción, transporte o comercialización de alimentos (FAO, s.f.) tanto a nivel nacional como internacional (Cárdenas, Silva, Morales & Ortiz, 2005). Estas características hacen que este grupo de sustancias sea considerado como un conjunto de interés en química ambiental y en diferentes áreas de las ciencias y de la salud. Tan interesantes son que existen diversos estudios experimentales donde se muestra que se pueden clasificar, por ejemplo, teniendo en cuenta el campo de acción en Herbicidas, Insecticidas, Fungicidas, Acaricidas y Nematicidas (INSHT, 1983), los cuales tienen funciones de controlar insectos y artrópodos, ácaros, nematodos que actúan como parásitos de las plantas, hongos (incluidas plagas, moho y royas), malas hierbas y plantas que crecen en lugares no oportunos respectivamente (Mohamed & Ahmed, 2020).

Específicamente, en este trabajo se realizó un análisis quimiotopológico de 60 moléculas plaguicidas definidas cada una por 15 propiedades. Las propiedades se normalizaron para no darles mayor peso a unas más que otras y dejarlas todas en un intervalo de 0 a 1.

Con la matriz de datos normalizada se hicieron 12 análisis de agrupamiento haciendo uso del software SPSS. Como resultado se obtuvieron 12 dendrogramas. Se seleccionó uno de los 12 dendrogramas, este fue con la función de similitud Euclidiana y la metodología de agrupamiento Vecino más lejano, teniendo en cuenta que en su gran mayoría los agrupamientos eran los mismos en todos los dendrogramas. Se extrajeron los agrupamientos de estos dendrogramas (base topológica) y se estudiaron propiedades topológicas clausura, frontera e interior para 5 subconjuntos teniendo en cuenta una clasificación previa experimental de los plaguicidas que fue descrita en el párrafo 2 de esta sección.

Estos subconjuntos fueron etiquetados con las letras H (Herbicidas), I (Insecticidas), F (Fungicidas), A (Acaricidas) y N (Nematicidas).

Como resultado se encontró que ninguno de los 5 subconjuntos es robusto, pues entre ellos existen relaciones de similitud. También, se logró reproducir relaciones experimentales entre plaguicidas descritas previamente en la literatura como las existentes entre el glifosato, paraquat y glufosinato, o entre omethoate y propoxur, o entre methomyl y methamidophos, entre otras que serán detalladas en la sección de análisis y discusión de resultados. Todo esto es relevante porque con este estudio se demuestra la importancia de estudiar todos los objetos químicos como un conjunto de sustancias químicas y no como objetos aislados. Además que el hecho de corroborar resultados experimentales haciendo uso de la química y la matemática, y específicamente del análisis quimi-topológico, son una muestra del poder predictivo que tiene esta herramienta y una motivación a seguirla usando.

Finalmente, es importante decir que esta investigación aporta y contribuye al medio ambiente, así: 1) Al ser un trabajo teórico no se está generando ningún tipo de desecho químico y por ende generando un impacto ambiental negativo sobre afluentes de agua, entre otros. 2) Los resultados aquí obtenidos muestran que existen relaciones de similitud entre plaguicidas que no han sido reportadas en la literatura y que proponemos como base de futuros estudios. 3) Este trabajo teórico y riguroso fundamentado en las ciencias básicas permite afirmar que las clasificaciones previas de los plaguicidas en unos u otros tipos no son robustas y que entre ellos existen relaciones de similitud, como ya se mencionaba anteriormente. Aquí, es importante mencionar que no fue necesario realizar un estudio experimental, y por ende provocar un impacto sobre el medio ambiente, para realizar esta afirmación. 4) Este estudio puede ser tomado como materia prima para nuevos estudios experimentales en los que ya se tiene un conocimiento previo (los resultados aquí planteados) para la búsqueda de nuevos sustitutos de reemplazo de unos plaguicidas por otros.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Desarrollar un estudio quimiotopológico de 60 moléculas de plaguicidas definidas cada una por 15 propiedades para encontrar relaciones de similitud entre estas sustancias que, hasta el momento, y según nuestra búsqueda bibliográfica, no han sido documentadas en la literatura.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Para cumplir con el objetivo general planteamos los siguientes 4 objetivos específicos, teniendo en cuenta que se busca comprobar o proponer nuevos estudios de reemplazo o sustitutos de otros plaguicidas más peligrosos, así:

- Compilar en una matriz de datos sesenta (60) moléculas plaguicidas definidas cada una por 15 de sus propiedades químicas y físicas, llevando a cabo análisis de agrupamientos con los datos de la matriz, extrayendo las ramas de los dendrogramas y definiendo la base topológica de cada uno de ellos.
- Estudiar los conjuntos clausura, frontera e interior haciendo uso de los conjuntos de interés químico (clasificación previamente seleccionada y disponible en la literatura) y la base topológica.
- Comparar los resultados obtenidos en este trabajo con los disponibles en la literatura.
- Someter los resultados de esta investigación a evaluación por parte de pares académicos especialistas en el área (congreso nacional e internacional o artículo académico).

ANTECEDENTES

Los plaguicidas que son las moléculas consideradas en este trabajo son sustancias altamente utilizadas en la agricultura, debido a que favorece y mejora los cultivos, incrementando la producción de alimentos (Guzmán, Guevara, Olguín & Mancilla, 2016). Esta industria inicio en Colombia en 1962, cuando se mezclaban ingredientes activos con solventes para el control de plagas, con el tiempo se han implementado nuevas sustancias pasando de 770 en el año 1974 a 1.370 para el año 2003 (OMS, 2018). Además, en países como Belice, Costa Rica, El Salvador, Guatemala, Honduras, Nicaragua y Panamá en las últimas décadas se ha incrementado el uso de los plaguicidas con un 1,3 Kg de persona/año, siendo este, uno de los más altos en el mundo (Lerro, Beane, DellaValle, Andreotti, Hofmann, Koutros, Parks, Shrestha, Alavanja, Blair, Lubin, Sandler & Ward, 2021).

Cabe resaltar que, esta investigación tiene un aporte significativo sobre los impactos ambientales y los efectos en la salud de las personas, generados por el uso de plaguicidas. Cabe mencionar que ese uso en diversos casos ocurre sin control y esto puede estar asociado, probablemente, a que en muchas ocasiones los agricultores no tienen dinero para pagar los altos precios que estos tienen y prefieren usar unos de bajo costo sin conocer el impacto ambiental que generan (Núñez, 1998).

Por ejemplo, en el año 2019 se desarrolló un estudio para encontrar si el costo de los insecticidas estaba relacionado con el impacto en la salud humana, para lo cual, determinaron la clase de impacto potencial sobre la salud humana (PICHE), siendo 2 la menos tóxica y 5 la más tóxica; para una variedad de insecticidas. Se encontró que los precios de los insecticidas de clase 2 como Metaldehyde oscilaban entre los 53,5 € ha⁻¹ año⁻¹, mientras que los que pertenecen a la clase 5 como Acrinathrin estaban entre los 32,0 € ha⁻¹ año⁻¹. Esto genera que los agricultores tiendan a usar los insecticidas menos costosos que son más peligrosos para los seres humanos y el medio ambiente (Bolzonella, Lucchetta, Teo, Boatto & Zanella, 2019).

Los plaguicidas en su mayoría son tóxicos para el ser humano, causando efectos agudos o crónicos en la salud en relación a las dosis y medios de exposición (Prieto, 2018). Por ejemplo, una investigación publicada por la revista Environmental International demuestra que algunos de los plaguicidas utilizados en la agricultura potencian el cáncer de tiroides (Topaz, Egozi, Suari, Ben-Ari, Sade, Chefetz & Yahel, 2020).

Por otro lado, se han realizado estudios epidemiológicos para el análisis de las intoxicaciones a partir de los plaguicidas. En Colombia, el uso de dichos productos se hace de forma constante y muchas veces sin un protocolo correspondiente (Cardenas, Silva, Morales & Ortiz, 2005). Por medio de dichos estudios, se ha llegado a la conclusión de que los plaguicidas de tipo organofosforados y carbamatos son los compuestos con mayores intoxicaciones presentadas (Ferrer, 2003).

Para contextualizar, una de las principales causas que tiene el empleo de los plaguicidas es su mal uso y manejo, tanto en la parte de implementación de seguridad personal como en el exceso de concentraciones de cada una de ellos (Núñez, 1998), lo que conlleva a intoxicaciones en la población, por medio de las vías de exposición respiratoria y dérmica en el momento de la aplicación de la sustancia (Bartual & Berenguer, 1983), como también a través del consumo de los alimentos con altas dosis de plaguicidas, envenenando a las personas por una absorción digestiva.

El uso de plaguicidas no solo afecta la salud de la población, se ha investigado que estos tienen impactos sobre el medio ambiente, ya que aumentan contaminaciones en el aire por las sustancias químicas liberadas, además de las reacciones que se podrían generar; en el suelo por el contacto directo por medio de los cultivos (Prieto, 2018) y así mismo en el agua por la biodegradación de materia orgánica con altos contenidos de contaminante (World Health Organization, 2019).

Por otro lado, la fauna también es perjudicada a partir de intoxicaciones por plaguicidas. México en 2011 realizó un estudio para comprobar dichas problemáticas y se encontró que cuando las aves están expuestas a sustancias organofosforadas reducen el consumo de alimentos, se afecta su vuelo y postura, además se generan cambios fisiológicos produciendo anorexia, efectos reproductivos o puede provocar la muerte de la especie (Cobos, Barrientos & Chi Novel, 2011).

Por lo mencionado anteriormente es importante realizar una clasificación de las moléculas plaguicidas. Para contextualizar, el conjunto de las sustancias químicas está conformado tanto por elementos como por compuestos. Los elementos químicos son quizás las primeras sustancias químicas estudiadas como un conjunto y no como objetos aislados. Mendeleiev agrupó a los elementos parecidos cerca y a los diferentes lejos (Villaveces, s.f). El trabajo conjuntista (desde el punto de vista de Villaveces) realizado por el científico ruso fue retomado en el año 2004 por Restrepo y colaboradores quienes reprodujeron las relaciones entre elementos que presenta la tabla periódica haciendo uso del análisis quimi-topológico, donde cada

uno de los elementos químicos fue definido por un cierto número de propiedades (Restrepo, Mesa, Llanos & Villaveces, 2004).

Tomando como base el estudio antes mencionado, Uribe en el año 2005 realizó un análisis quimi-topológico de compuestos químicos, monohidruros del cuarto periodo, y encontró entre otras cosas que las relaciones de similitud que existen entre los elementos del cuarto periódico de la tabla son transferibles a sus compuestos con un hidrógeno (Uribe, 2005). En 2011, Uribe reporta que las mismas relaciones de similitud que existen entre los elementos del cuarto periodo son transferibles a compuestos que tienen más de un átomo de hidrógeno (Uribe, 2011).

Las investigaciones continuaron, y en el año 2013, Quintero, Restrepo y Cohen realizaron un estudio quimi-topológico de dos grupos de radionúclidos (emisores de partículas elementales de uso actual y tomografía por emisión de partículas elementales) y encuentran que estos tienen similitudes a partir de propiedades nucleares, físicas, físico-químicas, dosimétricas y cuánticas. Para el año 2016 y 2020, Uribe y colaboradores, cambian su conjunto de moléculas de estudio, utilizando ahora óxidos de metales de transición y encuentran que sin importar si es hidrógeno o hidrógenos u oxígeno u oxígenos las relaciones de semejanza que existen entre los elementos se transfieren a sus compuestos. Además, logran reproducir relaciones entre compuestos que ya habían reportadas por la literatura con su estudio netamente químico, matemático y teórico (Trujillo, Ramírez, Rodríguez & Uribe, 2016) (Uribe, Ramírez & Trujillo, 2020).

Lo anterior es solo una muestra del trabajo valiosísimo que se ha venido realizando en cuanto al análisis de las sustancias químicas como un conjunto y no como objetos aislados dado que esto permite encontrar relaciones de similitud entre elementos y compuestos, y visibilizar que el análisis quimi-topológico se puede realizar no solo en elementos sino también en compuestos y que a través de este tipo de análisis es posible encontrar relaciones de similitud ya establecidas y proponer nuevas relaciones para ser estudiadas, lo que es importante desde el punto de vista, de reemplazos o sustitutos de unas sustancias por otras. Por ejemplo, de unas sustancias más contaminantes por otras menos contaminantes.

En este trabajo se hizo un análisis quimi-topológico de plaguicidas, que hasta donde se revisó la literatura es el primer estudio que busca corroborar la clasificación ya establecida de plaguicidas en grupos robustos (Herbicidas, Insecticidas, Fungicidas, Acaricidas y Nematicidas) y que adicionalmente busca encontrar nuevas relaciones de similitud entre este conjunto de moléculas o corroborar las ya reportadas en la literatura.

MARCO TEÓRICO

1. ¿Qué son los plaguicidas y cuáles son los tipos de plaguicidas?

Los plaguicidas son sustancias químicas mezcladas entre sí con el fin de prevenir, controlar y destruir las plagas que generan daños en la producción, transporte o comercialización de alimentos (FAO, s.f.).

Los plaguicidas se clasifican en:

- 1.1. Herbicidas.** Son productos químicos que se utilizan para inhibir o detener el crecimiento de las plantas indeseadas en los cultivos (AgroTerra, 2020).
- 1.2. Insecticidas.** Estas sustancias tienen como objetivo eliminar y matar las plagas de insectos (Fernández, Mancipe & Fernández, 2010).
- 1.3. Fungicidas.** Ayudan a controlar las enfermedades de los cultivos, incrementan la productividad de los mismos, mejoran el periodo de almacenamiento y calidad de las plantas como de los productos cosechados (Santamaría & Ureta, 2014).
- 1.4. Acaricidas.** Son productos químicos de uso agrícola para el control de ácaros (frutales, de hortalizas y ornamentales) (Sánchez, Osorio, Hernández, Hernández, Márquez & De la Cruz, 2017).
- 1.5. Nematicidas.** Son sustancias químicas que controlan los daños en los cultivos generados por los nematodos (Lezaun, 2016), animales microscópicos en su mayoría, incoloros con cuerpo sin segmentos (Aballay & Insunza, 2002).

Los plaguicidas también se han clasificado según su estructura y su modo de acción como se muestra en la tabla 1 (Ferrer, 2003).

Tabla 1. Clasificación de plaguicidas según su estructura química y su modo de acción

CLASIFICACIONES QUÍMICAS	CARACTERÍSTICAS [1]	MODO DE ACCIÓN [2]
Organoclorados	Derivados de halogenados de hidrocarburos alicíclicos, aromáticos y ciclodiénicos.	Modificación del canal de Sodio.
Organofosforados	Derivados de la estructura del fósforo.	Bloquean la acción de la enzima acetilcolinesterasa, interrumpiendo la transmisión de impulsos entre las células nerviosas.
Carbamatos	Derivados del ácido carbámico.	Inhibidores de acetilcolinesterasa.
Piretroide	Compuestos naturales que se encuentran en el extracto de piretro de ciertas flores de crisantemos.	Interfieren con los canales de sodio en la membrana nerviosa interrumpiendo la transferencia de iones e impulsos entre las células nerviosas.

Fuentes: [1] (Ferrer, 2003) y [2] (Devine, Eza, Ogusuku & Furlong, 2008).

También, se pueden clasificar de acuerdo con su toxicidad aguda como se muestra en la Tabla 2. Cabe resaltar que las concentraciones se determinan teniendo en cuenta la DL50 (dosis letal 50) para ratas, estos valores son tomados a partir de bioensayos realizados con la especie mencionada (World Health Organization, 2019).

Tabla 2. Clasificación de plaguicidas según la toxicidad aguda

Clase		DL50 para rata [mg/Kg de peso corporal]	
		ORAL	DÉRMICO
IA	Extremadamente peligroso	<5	<50
IB	Muy peligroso	5-50	50-200
II	Moderadamente peligroso	50-2000	200-2000
III	Ligeramente peligroso	hasta 2000	
U	Es Poco probable que presente un peligro agudo	mayor a 5000	

Fuente: World Health Organization, (2019). The WHO recommended classification of pesticides by hazard and guidelines to classification 2019.

2. Análisis Quimiotopológico

Este análisis comprende una secuencia de pasos que involucran la selección de las moléculas, la recolección de los datos de las propiedades que definen cada molécula, la realización de los análisis de agrupamientos con la matriz de datos (moléculas y propiedades), la obtención de los dendrogramas, la obtención de la base topológica, la selección de subconjuntos de interés y estudio de las propiedades clausura, frontera e interior (Quintero, Restrepo & Cohen, 2012).

2.1. Selección del conjunto de moléculas y las propiedades que las definen.

Es importante seleccionar un conjunto de moléculas teniendo en cuenta que para todas ellas se requiere un determinado número de propiedades. Con estos datos se construye una matriz que no puede tener espacios vacíos.

2.2. Homogeneización de las propiedades.

Para homogeneizar las propiedades con el fin de transformar cada una de ellas a un mismo intervalo numérico [0,1] (Uribe, 2005), se utilizó la ecuación que se muestra a continuación, en donde X_{ij} representa al valor de la propiedad i para el objeto j , $X_{i\min}$ el valor mínimo de la propiedad i y $X_{i\max}$ su máximo valor (Restrepo, Villaveces & Mesa, 2005).

$$|x_{ij}| = \frac{x_{ij} - x_{i\min}}{x_{i\max} - x_{i\min}}$$

2.3. Análisis de agrupamientos.

Para realizar el análisis de agrupamientos es importante tener en cuenta:

2.3.1. Coeficiente de similitud.

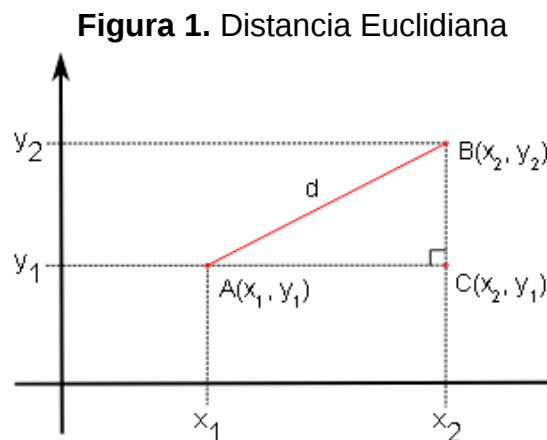
Con el fin de determinar si dos moléculas de un conjunto son parecidas o diferentes se debe definir una distancia que puede ser una métrica o una no métrica.

2.3.1.1. Métrica.

Es aquella función que define la distancia entre objetos de un sistema. Por ejemplo si $x, y, z, \dots$ son objetos de un conjunto, a cada una de las parejas (x, y) se le asigna un número real $d(x, y)$. Entonces el número $d(x, y)$ es la distancia entre x e y , lo cual debe cumplir (O Luis, 2011):

1. $d(x, y) \geq 0$, donde $x, y \in X$, y $d(x, y) = 0 \leftrightarrow x=y$, es decir que las distancias no son negativas y el único punto a distancia cero de x es el mismo x .
2. $d(x, y) = d(y, x) \quad x, y \in X$. La distancia es una función simétrica.
3. $d(x, y) \leq d(x, z) + d(z, y) \quad x, y, z \in X$. La longitud de un lado de un triángulo es menor que la suma de las longitudes de los otros dos lados.

Una de las métricas más conocidas es la distancia Euclidiana, esta se calcula a partir del teorema de Pitágoras, por medio de la fórmula $d^2 = A^2 + B^2$ donde, en todo triángulo rectángulo, el cuadrado de la hipotenusa (d) es igual a la suma de los cuadrados de los catetos (A y B), como se observa en la figura 1 (Mclibre, 2016).

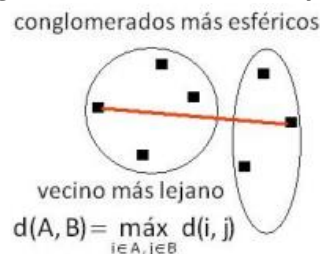


Fuente: Mclibre. (2016). Demostraciones de fórmulas matemáticas.

2.3.1.2. No métrica. Es aquella que establece similitudes entre objetos de un conjunto por diferentes medidas de sus propiedades. Si $\mathfrak{R}n$ es un espacio vectorial de propiedades, entonces dos elementos serán más similares en tanto más lo sean los radio-vectores (distancia entre el origen de una coordenada y un punto X dentro del plano cartesiano). Por lo cual, dos objetos con radio-vectores paralelos son muy similares. El coseno del ángulo formado por dos radio-vectores será la medida de similitud conocida como función coseno (Uribe, 2011).

2.3.2. Metodologías de agrupamiento. Para determinar las relaciones de similitud entre varios objetos al mismo tiempo y formar grupos, es necesario utilizar criterios de similitud entre más de dos objetos a la vez, por lo cual se tiene en cuenta las metodologías de agrupamientos (Uribe, 2011). Una de estas metodologías es la de Vecino más lejano, la cual mide la proximidad entre los agrupamientos, calculando la distancia entre sus objetos más lejanos, como se observa en la figura 2 (Perea, s.f.).

Figura 2. Vecino más lejano

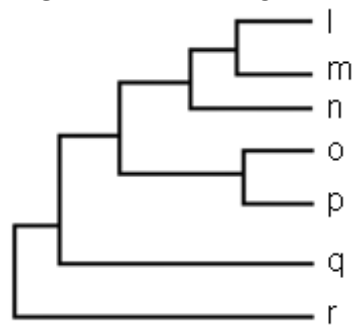


Fuente: Perea, J. (s.f.). Análisis Clúster.

2.3.3. Dendrogramas. Como resultado del análisis de agrupamientos se obtiene un dendrograma (figura 3) o árbol de clasificación (Mesa, Restrepo & Villaveces, 2008). Para extraer los agrupamientos y la base topológica del dendrograma se utilizó la metodología descrita por Restrepo, Mesa y Villaveces en el 2005.

Los siguientes ejemplos son elaboración propia, pero se tuvo en cuenta la metodología descrita por Uribe, Ramírez y Trujillo en el año 2020.

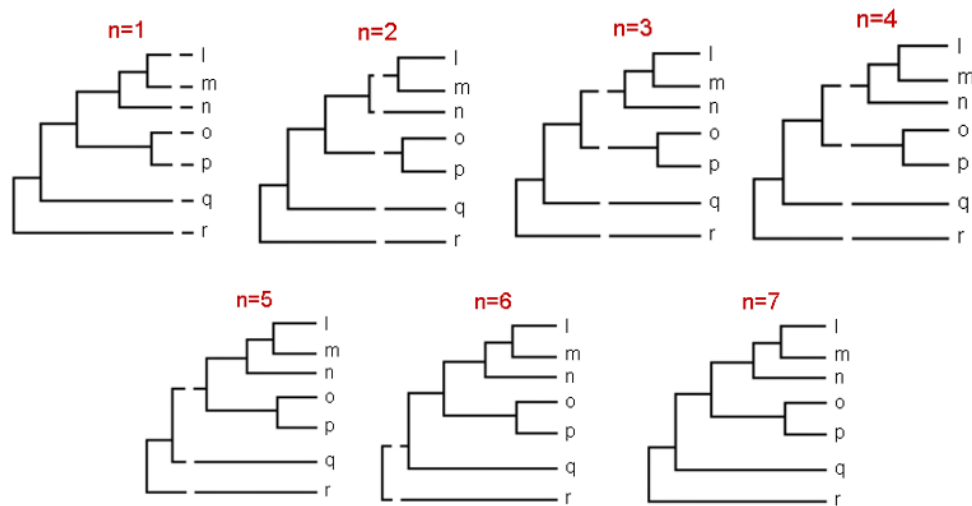
Figura 3. Dendrograma



Fuente: Elaboración propia

2.3.4. Extracción de los agrupamientos. Para extraer los agrupamientos, se debe tener presente cuántas moléculas u objetos de estudio aparecen en el dendrograma. Para este ejemplo son 7 teniendo en cuenta que es el número de los objetos entre l y r. Es decir que para el ejemplo de la figura 4 tendremos que realizar cortes de las ramas del dendrograma en $n=1$, $n=2$, $n=3$, $n=4$, $n=5$, $n=6$ y $n=7$.

Figura 4. Corte de las ramas del dendrograma



Fuente: Elaboración propia

Para cada número n se calcula el número de agrupamientos (C), para lo cual se realiza el corte de las ramas, como se observa en la figura 4 (Restrepo, Mesa & Villaveces, 2005).

- Cuando $n=1$ se tienen 7 agrupamientos de máximo 1 objeto.
- Cuando $n=2$ se obtienen 2 ramas de dos objetos que son el agrupamiento $\{l, m\}$, y el agrupamiento $\{o, p\}$, y 3 ramas de un objeto.
- Para $n=3$ y $n=4$ se obtienen en total 4 agrupamientos que son $\{l, m, n\}$, $\{o, p\}$, $\{q\}$ y $\{r\}$.
- Cuando $n=5$ se obtienen tres agrupamientos $\{l, m, n, o, p\}$, $\{q\}$, $\{r\}$.
- Cuando $n=6$ se obtienen 2 agrupamientos $\{l, m, n, o, p, q\}$ y $\{r\}$.

- Y con $n=7$ se obtiene un solo agrupamiento que es el que agrupa a todos los objetos que son las letras del abecedario.

Para cada C se calcula la población $\prod_i c_i$, y con la multiplicación de C y $\prod_i c_i$ se obtiene el número de selección S como se observa en la figura 5 (Restrepo, Mesa & Villaveces, 2005).

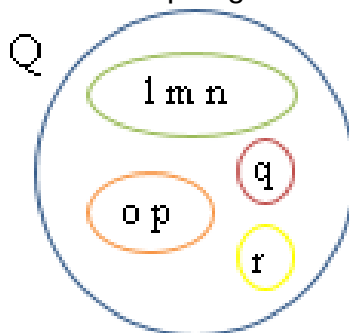
Figura 5. Número de agrupamientos con su población y cálculo del número de selección

n	C	$\prod_i c_i$	S
1	7	$1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 \times 1 = 1$	$1 \times 7 = 7$
2	5	$2 \times 1 \times 2 \times 1 \times 1 = 4$	$4 \times 5 = 20$
3=4	4	$3 \times 2 \times 1 \times 1 = 6$	$6 \times 4 = 24$
5	3	$5 \times 1 \times 1 = 5$	$5 \times 3 = 15$
6	2	$6 \times 1 = 6$	$6 \times 2 = 12$
7	1	7	$7 \times 1 = 7$

Fuente: Uribe, Ramírez & Trujillo, 2020. Estudio teórico y quimiotoptológico de sustancias químicas TMO_n (TM=Sc-Zn y $n=1-4$).

Se selecciona el valor de n que tenga el S máximo, con el fin de construir la base topológica B_n (Restrepo, Mesa & Villaveces, 2005). Para este ejemplo $n=3$ y $n=4$ obtuvieron el mismo valor del número de selección, por lo cual se escoge el valor mínimo dado que el número de agrupamientos no va a cambiar si se escoge con $n=3$ o $n=4$. La base topológica B_3 para este ejemplo se muestra en la figura 6.

Figura 6. Base topológica del ejemplo



Fuente: Elaboración propia

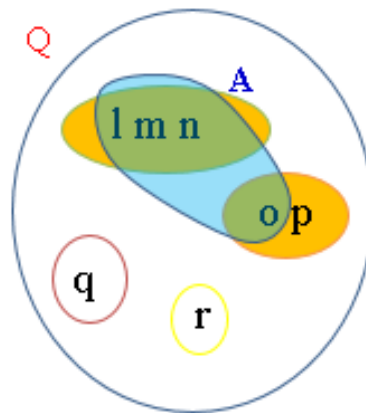
2.4. Topología

Una vez obtenida la base topológica se seleccionan subconjuntos de interés y para ellos se estudian propiedades topológicas. Es importante tener presente que la topología es una rama de las matemáticas, la cual sirve para encontrar relaciones entre propiedades físicas y químicas (Amigo, Falcó, Gálvez & Villar, 2007).

2.4.1. Propiedades topológicas. A partir de la base topológica obtenida se identifican las relaciones por medio de los conjuntos clausura, frontera e interior de un subconjunto que para efectos de este ejemplo será el subconjunto A que está conformado por $A = \{l, m, n, o\}$ que en la figura 4 esta demarcado por el color azul.

2.4.1.1. Conjunto Clausura. El conjunto clausura de A es aquel conformado por todos los objetos de Q que tienen propiedades semejantes a las de los objetos de A, como se ilustra en la figura 7 por medio del sombreado en color amarillo (Uribe, 2011).

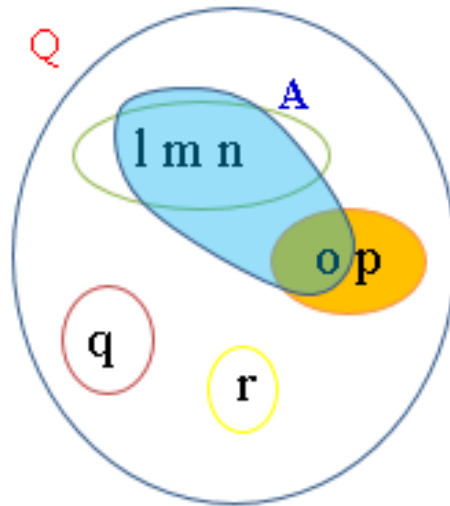
Figura 7. Clausura de A



Fuente: Elaboración propia

2.4.1.2. Conjunto frontera. Es aquel conformado por todos los objetos cuyas propiedades son semejantes a las propiedades de los objetos de A y a las propiedades del resto de objetos que no pertenecen al subconjunto A, como se ve en la figura 8 por medio del sombreado color amarillo (Uribe, 2011).

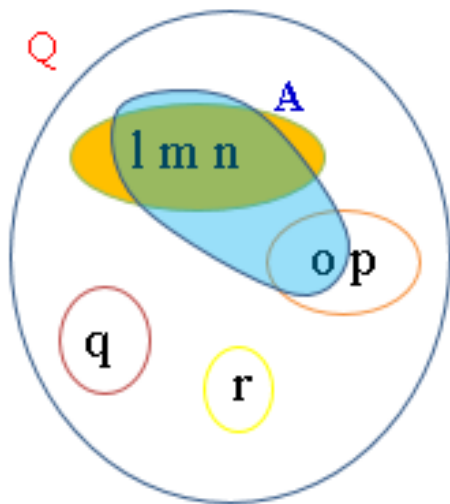
Figura 8. Frontera de A



Fuente: Elaboración propia

- 2.4.1.3. Conjunto interior.** Es aquel que contiene objetos de Q cuyas propiedades solo se parecen a los objetos de A y no a ningún otro subconjunto, como se ve en la figura 9 por medio del sombreado color amarillo (Uribe, 2011).

Figura 9. Interior de A

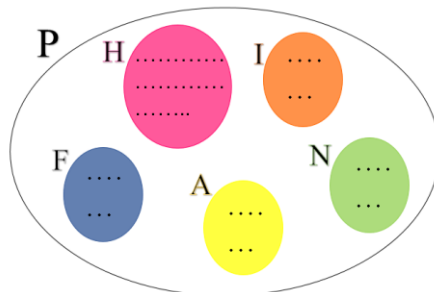


Fuente: Elaboración propia

METODOLOGÍA

- Selección de las moléculas a estudiar.** Se seleccionaron 60 moléculas de cinco subconjuntos que corresponden a la clasificación de los plaguicidas en: Herbicidas, Insecticidas, Fungicidas, Acaricidas y Nematicidas, etiquetados con las letras H, I, F, A, N, respectivamente. Con el objetivo de precisar el nombre de los conjuntos y subconjuntos de estudio se construyó la Figura 10 en donde se muestra que el conjunto de las 60 moléculas es el conjunto P y dentro de este conjunto hay 5 subconjuntos que son los Herbicidas (H), Insecticidas (I), Nematicidas (N), Acaricidas (S) y Fungicidas (F).

Figura 10. Conjunto P plaguicidas



Fuente: Elaboración propia

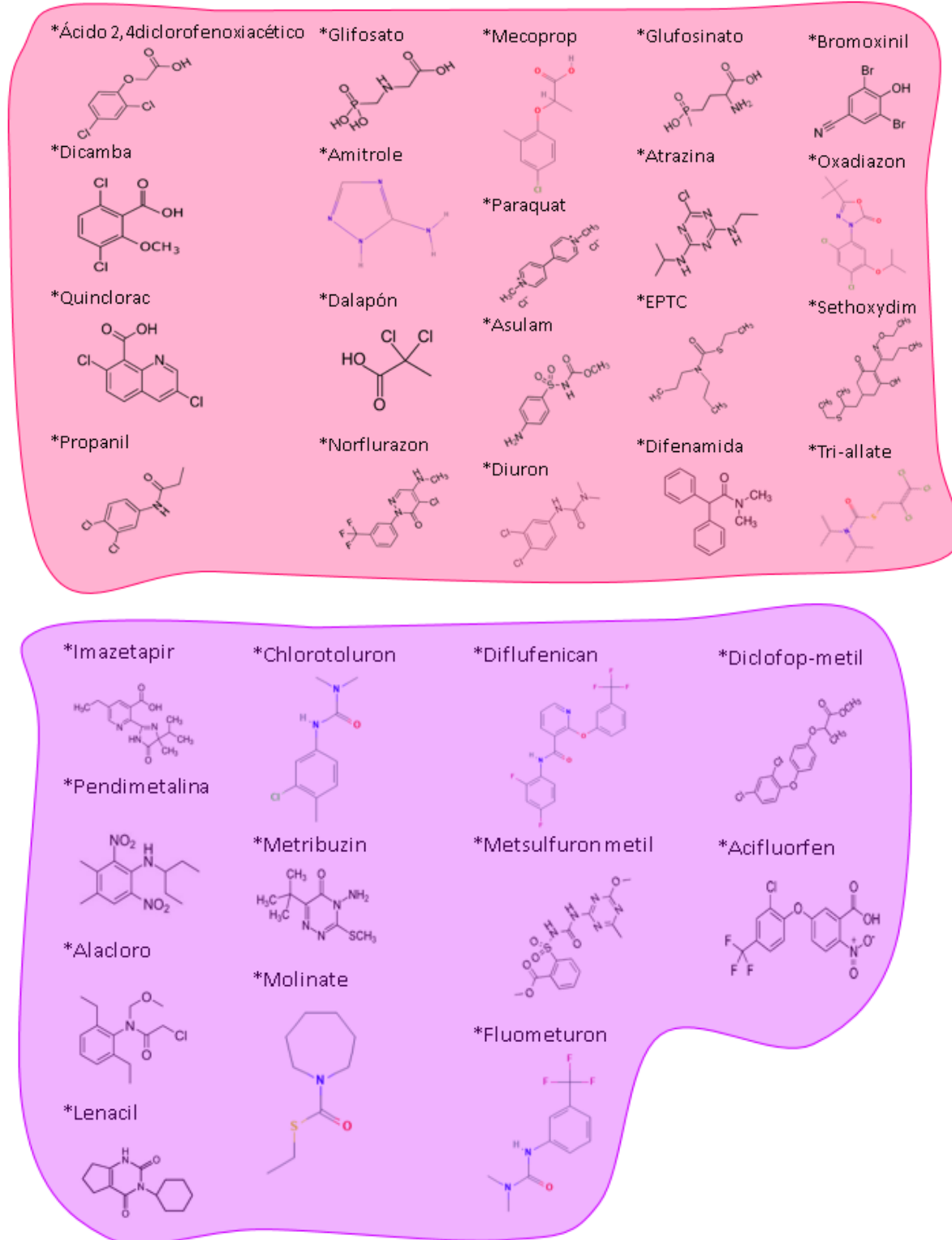
Cada uno de estos subconjuntos está conformado por un número específico de moléculas que se muestran en las figuras de la 11 a la 15.

Figura 11. Formación de Herbicidas (H)



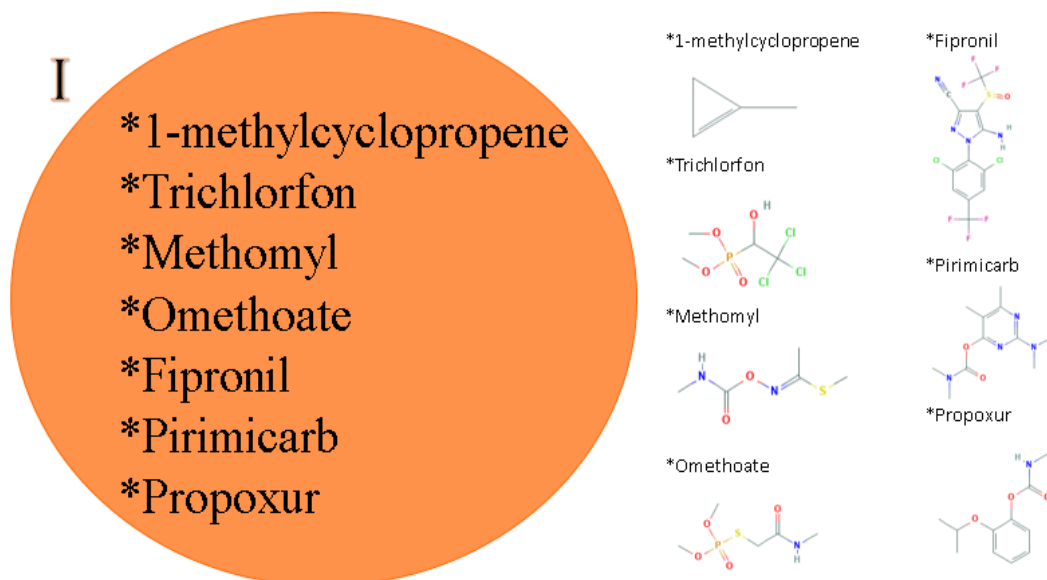
Fuente: Elaboración propia

Figura 11A. Geometría molecular de cada molécula de Herbicidas (H)



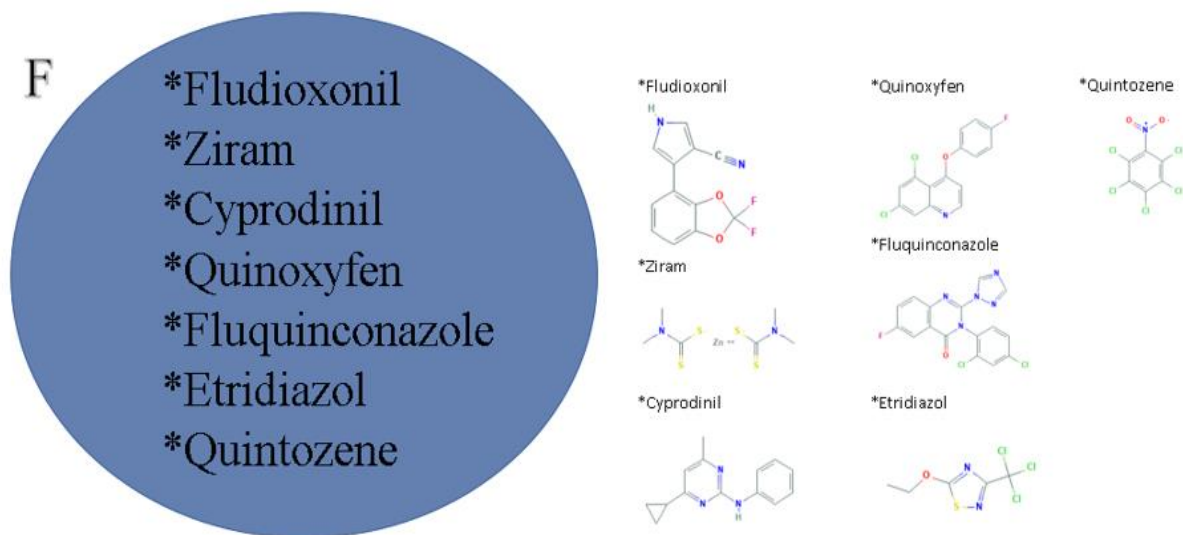
Fuente: Base de datos PubChem

Figura 12. Formación de Insecticidas (I) y sus respectivas geometrías moleculares



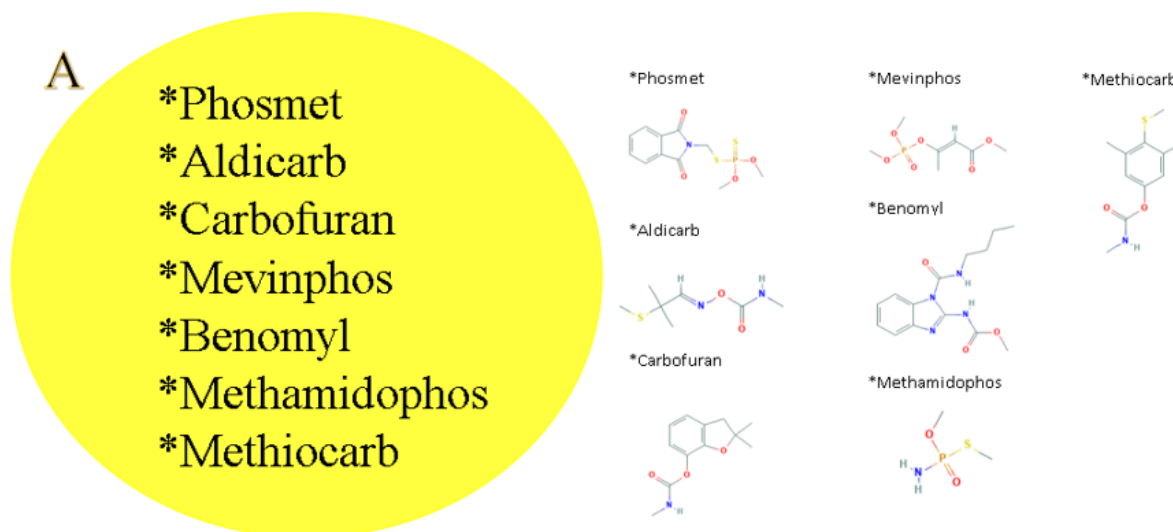
Fuente: Propia y geometría molecular de la Base de datos PubChem

Figura 13. Formación de Fungicidas (F) y sus respectivas geometrías moleculares



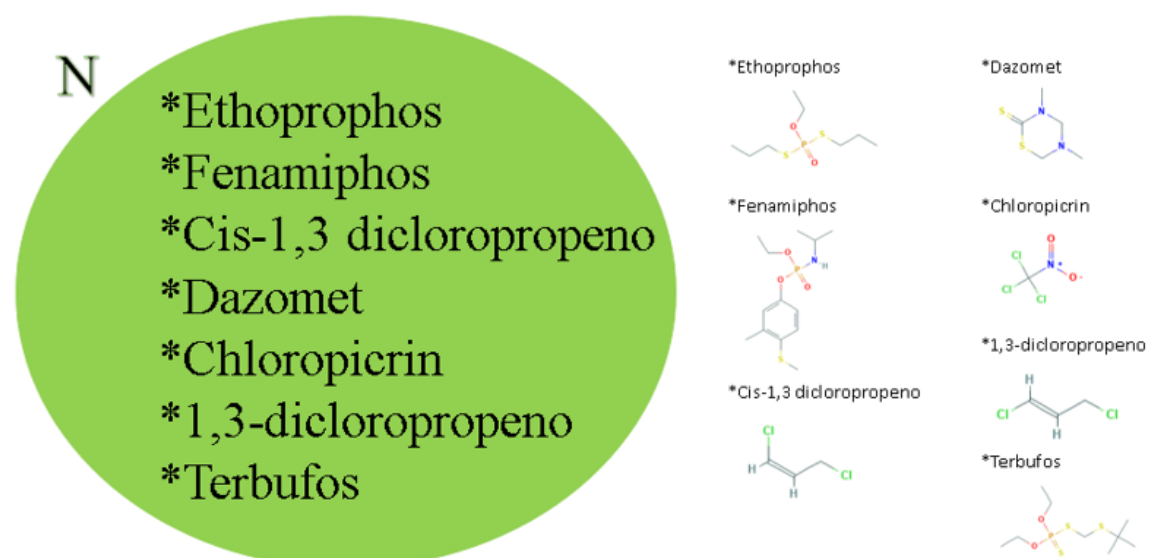
Fuente: Propia y geometría molecular de la Base de datos PubChem

Figura 14. Formación de Acaricidas (A) y sus respectivas geometrías moleculares



Fuente: Propia y geometría molecular de la Base de datos PubChem

Figura 15. Formación de Nematicidas (N) y sus respectivas geometrías moleculares



Fuente: Propia y geometría molecular de la Base de datos PubChem

2. **Definir cada una de las moléculas por sus propiedades.** Para cada una de las 60 moléculas se buscaron propiedades para definirlas. Es importante recordar que estas propiedades deben estar disponibles o definidas para todas las moléculas pues no es posible construir una matriz de datos (moléculas x

propiedades) con espacios vacíos. Las 15 propiedades que definen cada molécula se muestra en la Tabla 3.

Tabla 3. Propiedades fisicoquímicas utilizadas en el estudio

PROPIEDADES EXPERIMENTALES	PROPIEDADES TEÓRICAS
Peso molecular	Energía total
Densidad	
Punto de ebullición a 760 mmHg	Energía térmica
Punto de inflamación	
Solubilidad en agua	Capacidad calorífica
Presión de vapor a 25°C	
Punto de fusión	Entropía
Coeficiente de partición de octanol agua	
Ley de Henry	Momento dipolar
Toxicología DL50 oral en ratas	

Tabla 3. Los datos experimentales se extrajeron de la literatura por medio de bases de datos como Pubchem, LGC standards, Merck, Molbase, Chemnet y ChemDplus; los teóricos se calcularon a partir del programa Gaussian 09 con BPW91/DGDZVP como método de cálculo.

- 3. Normalización de la matriz 15x60.** Con la matriz (anexo A), se realizó la normalización de los datos con el objetivo de llevar cada propiedad al mismo intervalo numérico de [0,1] con el fin de no darle mayor peso a unas propiedades más que a otras, dado que contienen cifras diferentes (Anexo B).
- 4. Análisis de agrupamiento.** Con la matriz de datos normalizada se realizaron 12 análisis de agrupamientos con tres (3) funciones de similitud (Euclidiana, Coseno y Minkowski) y cuatro (4) metodologías de agrupamiento (Centroide, Mediana, Ward y Vecino más lejano) (tabla 4) por medio del software SPSS (Raynald Levesque and IBM Corp, 2011).

Tabla 4. Funciones de similitud y métodos de agrupamiento, utilizados en análisis de agrupamientos.

Funciones de similitud	Metodologías de agrupamiento
Euclidiana	Centroide
Minkowski	Mediana
Coseno	Ward
	Vecino más lejano

Fuente: Elaboración propia

- 5. Extracción de agrupamientos.** Se hizo el corte de las ramas para cada uno de los 12 dendrogramas y se extrajeron las bases topológicas utilizando la metodología descrita por Restrepo, Mesa y Villaveces en 2005. Se seleccionó un número entre 1 y 60 (n). Para cada n , se calculó el número de agrupamientos (C) y su población $\prod_{ii} C$. Luego, con la multiplicación de C y $\prod_{ii} C$ se calculó S . Con el valor de n para el cual S era el máximo, se construyó la base topológica B_n (Restrepo, Mesa & Villaveces, 2005).

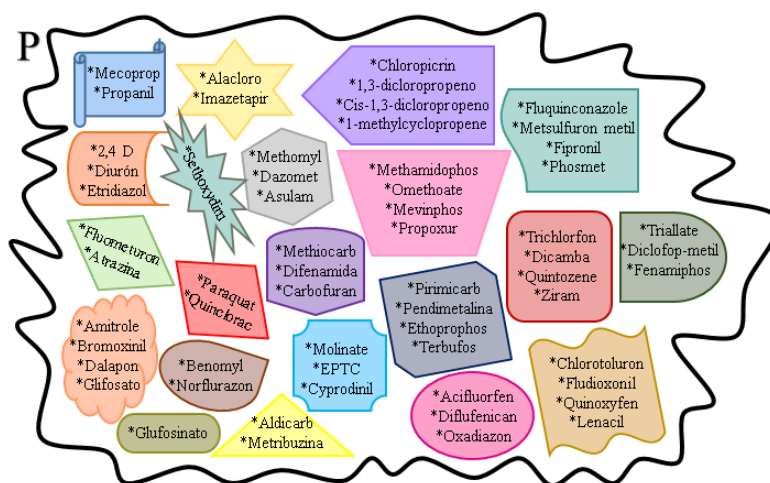
Teniendo en cuenta que la mayoría de ellas presenta los mismos agrupamientos se seleccionó la base topológica obtenida con la función de similitud Euclidiana y la metodología de agrupamiento de Vecino más lejano (Anexo C).

- 6. Estudio de las propiedades topológicas.** Los subconjuntos seleccionados para el estudio de las propiedades topológicas clausura, frontera e interior fueron los 5 subconjuntos H, I, F, A y N en los que han sido clasificadas por la literatura las 60 moléculas plaguicidas que constituyen el conjunto P. Para más detalle de cómo se extrajeron las ramas de los dendrogramas y cómo se estudiaron las propiedades topológicas se sugiere revisar los ejemplos que aparecen en la sección análisis quimiotopológico del marco teórico.

ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

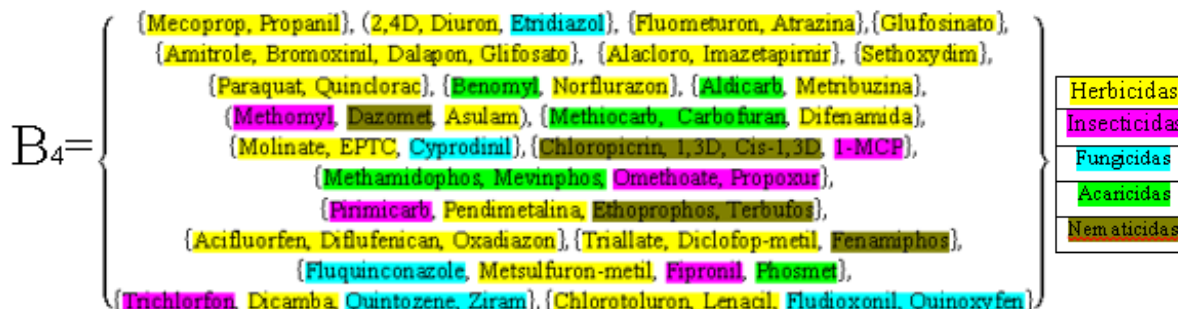
- Análisis de agrupamientos.** Como resultado del análisis de agrupamientos obtenido con función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento del Vecino más lejano se obtuvo la base topológica B_4 . Las figuras 16 y 17 muestran dos representaciones diferentes de la misma base topológica. Las 60 moléculas de este estudio que hacen parte del conjunto P (figura 16) están asociadas en máximo agrupamientos de 4 moléculas (base topológica B_4) como se aprecia en las Figuras 16 y 17.

Figura 16. Base topológica obtenida con la función de similitud Euclidiana y la metodología de agrupamiento Vecino más lejano.



Fuente: Elaboración propia

Figura 17. Diagrama de conjuntos

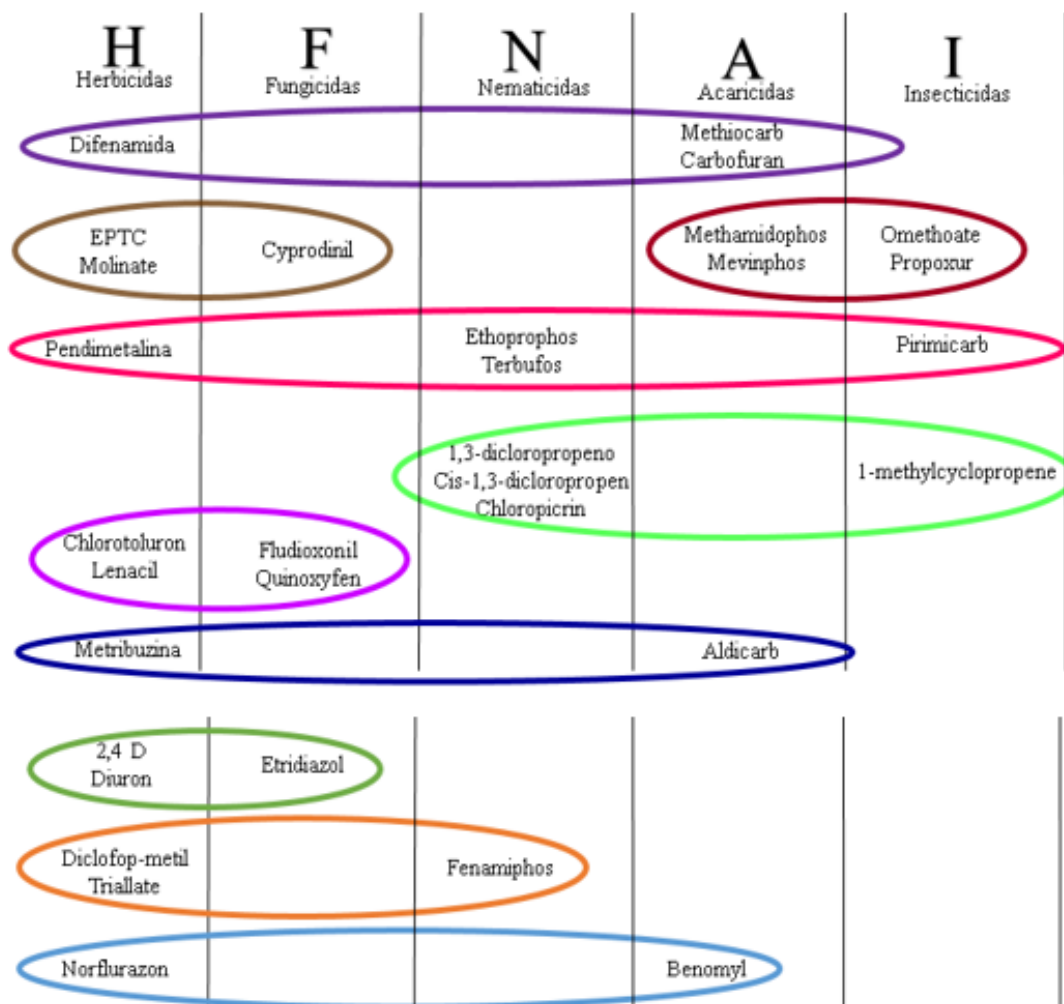


Fuente: Elaboración propia

En la figura 17 y subrayadas por colores se puede apreciar que existe una relación entre diferentes tipos de plaguicidas (Herbicidas, Insecticidas, Fungicidas, Acaricidas y Nematicidas). Por ejemplo, si se observa el primer agrupamiento que aparece en la línea 4 de la Figura 17 se puede ver que 3 tipos de plaguicidas están en un mismo agrupamiento. Aquí se encuentran methomyl que es un Insecticida, dazomet que es un Nematicida y asulam que es un Herbicida.

Después de realizar un estudio entre plaguicidas se encontró que 43 de las 60 moléculas están relacionadas con otros subconjuntos. Los Herbicidas se relacionan con todos los subconjuntos, mientras que los Nematicidas solo se relacionan con Herbicidas e Insecticidas. Los Acaricidas se relacionan con Herbicidas, Fungicidas e Insecticidas, como se ilustra en la figura 17.

Figura 18. Relaciones de todos los subconjuntos



H Herbicidas	F Fungicidas	N Nematicidas	A Acaricidas	I Insecticidas
Asulam		Dazomet		Methomyl
Metsulfuron-metil	Fluquinconazole		Phosmet	Fipronil
Dicamba	Quintozene Ziram			Trichlorfon
Acifluorfen Diflufenican Oxadiazon Mecoprop Propanil Sethoxydim Amitrole Bromoxinil Dalapon Glifosato Glufosinato Paraquat Quinclorac Fluometuron Atrazina Alacloro Imazetapir				

Fuente: Elaboración propia

La figura 18 muestra los resultados obtenidos de los agrupamientos y 13 las relaciones que se presentan entre los subconjuntos:

- 1) Difenamida, methiocarb y carbofuran, un Herbicida y dos Acaricidas respectivamente.
- 2) EPTC, molinate y cyprodinil, dos Herbicidas y un Fungicida respectivamente.
- 3) Methamidophos, mevinphos, omethoate y propoxur, dos Acaricidas y dos Insecticidas respectivamente.
- 4) Pendimetalina, ethoprophos, terbufos, pirimicarb, un Herbicida, dos Nematicidas y un Insecticida respectivamente.

- 5) 1,3-dicloropropeno, Chloropicrin y 1-methylcyclopropene, dos Nematicidas y un Insecticida respectivamente.
- 6) Chlorotoluron, lenacil, fludioxonil, quinoxifen, dos Herbicidas y dos Fungicidas respectivamente.
- 7) Metribuzina y aldicarb, un Herbicida y un Acaricida respectivamente.
- 8) 2,4 D, diuron y etridiazol, dos Herbicidas y un Fungicida respectivamente.
- 9) Diclofop-metil, triallate y fenamiphos, dos Herbicidas y un Nematicida respectivamente.
- 10) Norflurazon y benomyl, un Herbicida y un Acaricida respectivamente.
- 11) Asulam, dazomet, methomyl, un Herbicida, un Nematicida y un Insecticida respectivamente.
- 12) Metsulfuron-metil, fluquinconazole, fipronil y phosmet, un Herbicida, un Fungicida, un Insecticida y un Acaricida respectivamente.
- 13) Dicamba, trichlorfon, quintozone y ziram, un Herbicida, un Insecticida, y dos Fungicidas respectivamente.

Es importante señalar que algunas de estas relaciones aquí predichas utilizando la quimiopatólogía ya han sido reportadas previamente (relaciones 3, 4 y 5 numeradas anteriormente). Por ejemplo:

- En base al agrupamiento formado por Methamidophos, mevinphos, omethoate y propoxur se corroboró experimentalmente, que el omethoate es similar al propoxur para el control de los saltamontes en el cultivo de la caña de azúcar (Fewkes & Greathead, 1978).

- En relación con el agrupamiento formado por Pendimetalina, ethoprophos, terbufos, y pirimicab se encontró que la pendimetalina es una alternativa viable para sustituir el pirimicarb en el cultivo de la lechuga contra bluegrass (Steingrimsdottir, Petersen & Fantke, 2018).
- Con respecto al agrupamiento conformado por 1,3-dicloropropeno, Chloropicrin y 1-methylcyclopropene se encontró en la literatura que el 1,3-dichloropropene y el chloropicrin son similares y pueden usarse como sustitutos el uno del otro en el control de nematodos, hongos y malezas en el suelo (Dungan & Yates, 2003).

De las otras 10 relaciones no encontramos hasta la fecha evidencia experimental de que hubiesen sido estudiadas, por lo que son sugeridas como nuevos temas de estudio dado que se evidencia que algunas de estas son menos peligrosas que otras y pudieran ser, probablemente, objeto de reemplazo o sustitución, así:

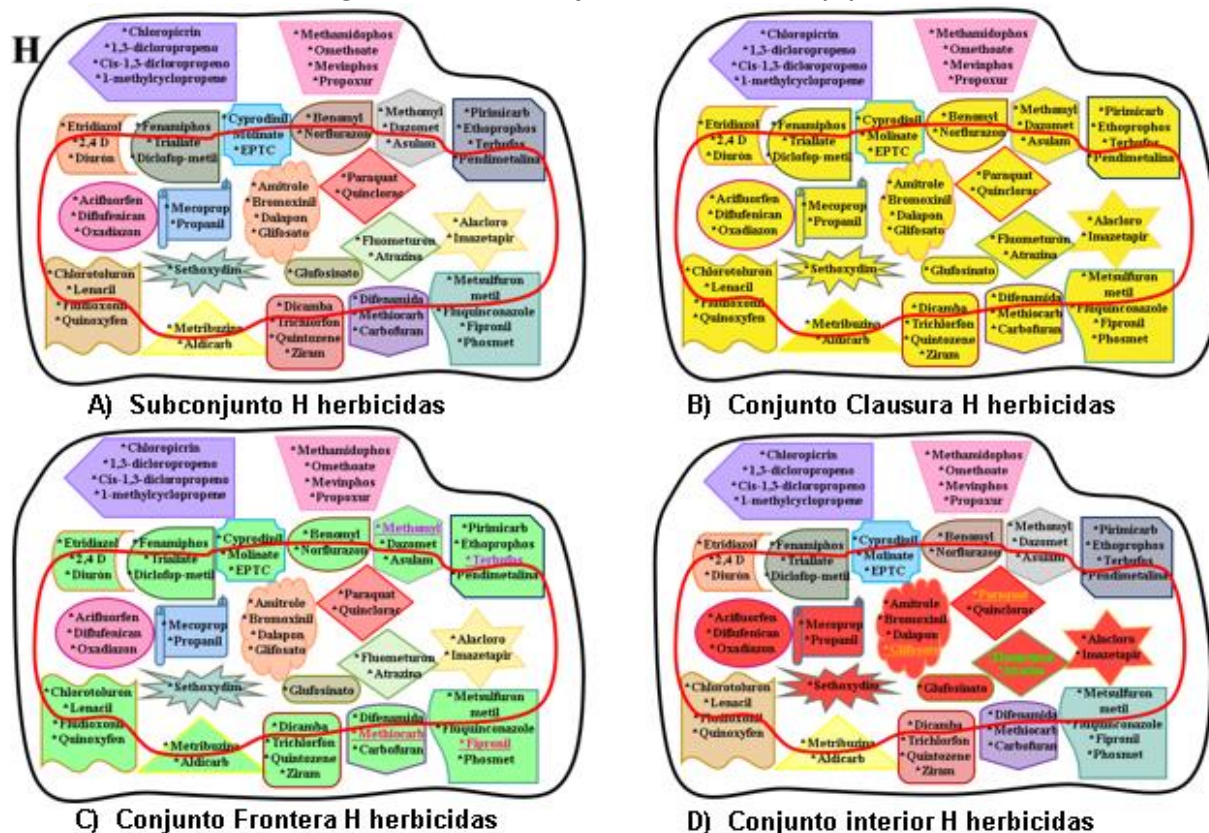
- Difenamida, methiocarb y carbofuran. Según la Organización Mundial de la Salud difenamida es menos peligrosa que las otras dos moléculas.
- EPTC, molinate y cyprodinil. Toxicológicamente las tres moléculas hacen parte de la clasificación de moderadamente peligrosa, según la clasificación de la Organización Mundial de la Salud.
- Chlorotoluron, lenacil, fludioxonil, quinoxifen, estas 4 moléculas tienen un riesgo bajo y poco probable que presenten un peligro agudo.
- Metribuzina y aldicarb. Toxicológicamente metribuzina es menos peligrosa que aldicarb.
- 2,4 D, diuron y etridiazol. El diuron es el menos peligroso de este agrupamiento perteneciendo a la clasificación de no presentar un peligro agudo.
- Diclofop-metil, triallate y fenamiphos. En la parte toxicológica el diclofop-metil es el menos peligroso.

- Norflurazon y benomyl. Ambas moléculas pertenecen a la clasificación U de la Organización Mundial de la Salud por ser poco probables de presentar un peligro agudo en la salud.
- Asulam, dazomet, methomyl. Toxicológicamente el asulam es el menos peligroso perteneciendo a las clasificación de poco probable de presentar un peligro agudo, mientras que el dazomet es una molécula ligeramente peligrosa y el methomyl es altamente peligrosa para la salud de las personas.
- Metsulfuron-metil, fluquinconazole, fipronil y phosmet. El metsulfuron-metil es la molécula menos peligrosa de este agrupamiento con clasificación U (poco probable de presentar un peligro agudo), mientras que el resto de moléculas de este grupo hacen parte a la clasificación II (moderadamente peligrosas).
- Dicamba, trichlorfon, quintozone y ziram. Cabe resaltar que de este agrupamiento obtenido a partir de la base topológica la molécula menos peligrosa es quintozone con una categoría U (poco probable que presente peligro agudo).

2. Conjuntos clausura, frontera e interior de cada subconjunto.

En la figura 19A y señalados dentro de la línea roja se encuentran las moléculas Herbicidas aquí estudiadas. También, se observa la clausura (sombreado en color amarillo), frontera (sombreado en color verde) e interior (sombreado en color rojo) del subconjunto H. Los conjuntos clausura y frontera de H muestran relaciones entre Herbicidas y Fungicidas, Nematicidas, Insecticidas y Acaricidas. Es decir que, algunos Herbicidas tiene funciones de Fungicidas e inversamente. Los Nematicidas, Insecticidas y Acaricidas también tienen funciones similares.

Figura 19. Subconjunto Herbicidas (H)



Fuente: Elaboración propia

El conjunto interior de H, sugiere que el acifluorfen, diflufenica, oxadiazon, mecoprop, propanil, sethoxydim, amitrole, bromoxinil, dalapon, glifosato, paraquat, quinclorac, fluometuron, atrazina, alacloro e imazetapir solo se parecen entre ellos y no se parecen a otros elementos del subconjunto H.

Se buscó en la literatura artículos relacionados con estos Herbicidas y con posibles relaciones entre ellos, tomando como base las sustancias H que hacen parte del conjunto interior, y se encontró que:

- En el año 2007, Nemat, Hassan y El-Bastawisy sugirieron que la atrazina se puede reemplazar por el fluometuron, en cultivos de maíz (Nemat, Hassan & El-Bastawisy, 2007).
- En el año 2021, Hoyos, Guido, Vázquez, Palma, Rojano y De prada dijeron que el paraquat y el glufosinato son similares, ya que tienen aplicaciones de pre-

siembra para prevenir la propagación de *C. radiata* (Hoyos, Guido, Vázquez, Palma, Rojano & De prada, 2021), esto es un resultado importante, debido a que el glufosinato es menos peligroso que el paraquat según la organización mundial de la salud. Adicionalmente, Takanoa, Pattersonb, Nissena, Dayana & Gaines en el año 2019 mostraron que el glifosato y glufosinato son Herbicidas hidrófilos similares (Takanoa, Pattersonb, Nissena, Dayana & Gaines, 2019),

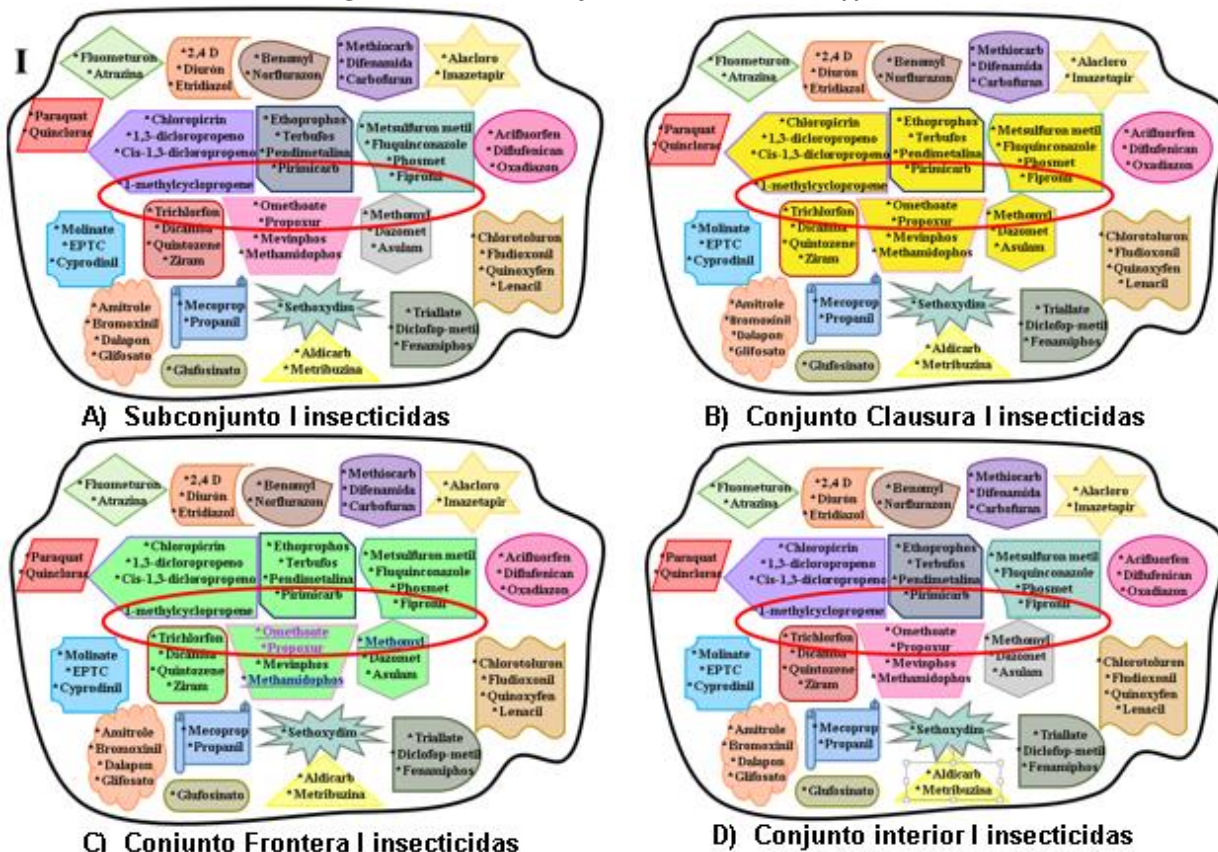
- En el año 2006, Humbert, Margni, Charles, Torres, Quiro y Jolliet dijeron que el paraquat podría ser sustituido por glifosato en las plantaciones de banano desde un punto de vista favorable ambientalmente (Humbert, Margni, Charles, Torres, Quiro & Jolliet, 2006), resaltando que el paraquat está clasificado como moderadamente peligroso, mientras que el glifosato como se decía anteriormente, tiene poca probabilidad que presente un peligro agudo.

En la literatura no fue posible encontrar relaciones entre otros de los Herbicidas que hacen parte del conjunto interior H. Sin embargo, consideramos posible sugerir la realización de estudios experimentales que corroboren las relaciones de similitud aquí encontradas y buscando, en lo posible, que sean reemplazo los unos por los otros siempre y cuando estos reemplazos sean favorables, en lo posible, para el medio ambiente y la sociedad.

Por otra parte, es importante mencionar que este estudio confirma el resultado obtenido en la investigación “Análisis quimi-topológico de 25 Herbicidas regulados por el Instituto Colombiano Agropecuario-ICA”, en donde el glifosato es un posible reemplazo del glufosinato. Además se mantienen relaciones entre el alacloro e imazatapir y acifluorfen con diflufenican (Rodríguez, 2021), teniendo en cuenta que para este trabajo solo se tomaron 15 propiedades fisicoquímicas, mientras que la investigación mencionada anteriormente, obtuvo sus resultados con 24 propiedades.

En la figura 20A se encuentran las moléculas de insecticidas estudiadas en este trabajo, presentadas dentro de la línea roja. En las figuras 20B, 20C y 20D se observa la clausura (sombreado en color amarillo), frontera (sombreado en color verde) e interior (sombreado en color rojo) del subconjunto I respectivamente.

Figura 20. Subconjunto Insecticidas (I)



Fuente: Elaboración propia

Los conjuntos clausura y frontera de I insecticidas están constituidos por los mismos elementos, como se observa en las figuras 20B Y 20C. Estos conjuntos muestran relaciones entre Nematicidas y Herbicidas, como Terbufos y metsulfuron-metil. Fungicidas con Insecticidas como fluquinconazole y methomyl. Acaricidas con Fungicidas como phosmet y ziram. Es decir que, estos posibles sustitutos de reemplazo cumplen con la misma función.

Se buscó en la literatura artículos que corroboren las relaciones entre las moléculas que hacen parte de los conjuntos clausura y frontera del subconjunto de Insecticidas, y se encontró que:

- En el año 1978, Fewkes y Greathead sugirieron que omethoate era similar a propoxur para el control de los saltamontes en el cultivo de la caña de azúcar (Fewkes & Greathead, 1978). Este resultado es significativo debido a que propoxur es menos peligroso que omethoate.

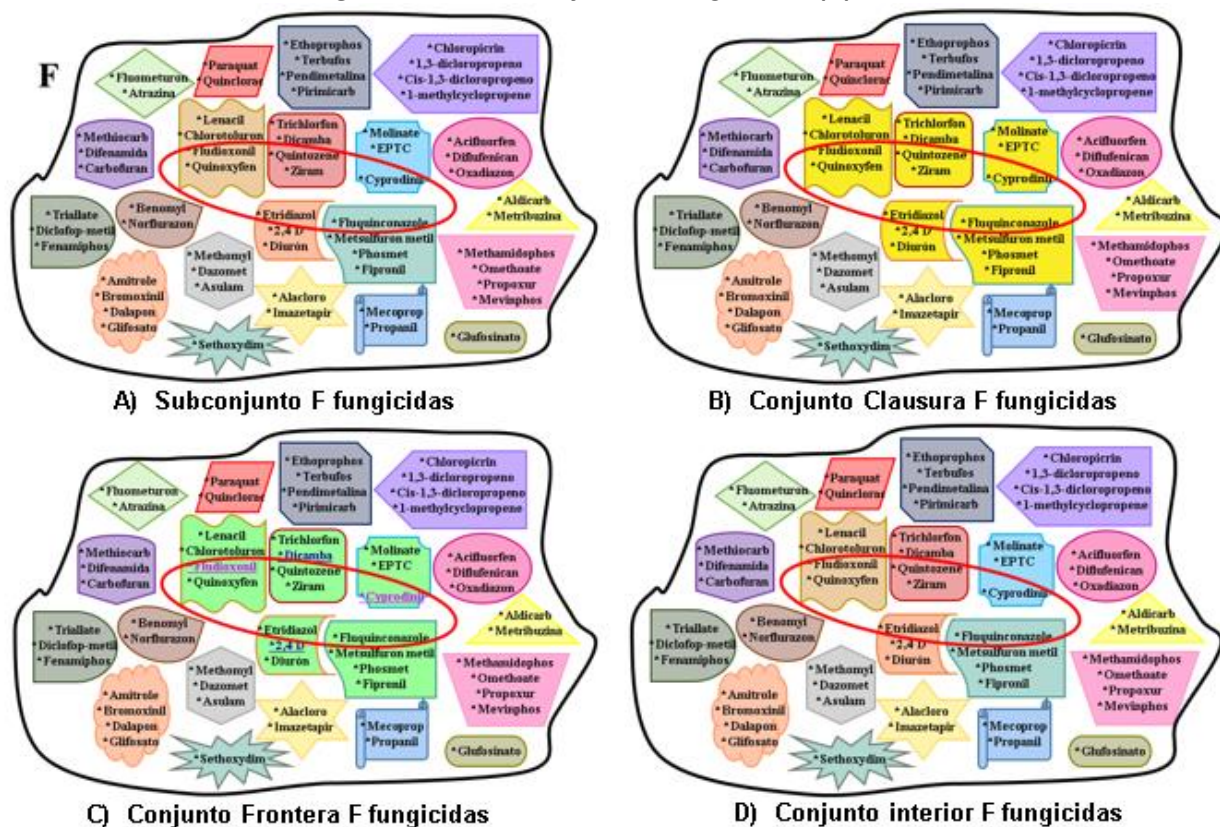
- En el año 1995, Robertson, Allsopp, Chandler y Mullins expusieron que el ethoprophos y el terbufos tienen resultados satisfactorios y similares contra la larva de la caña (Robertson, Allsopp, Chandler & Mullins, 1995), es importante retomar y construir una nueva investigación dado que ethoprophos y terbufos son sustancias extremadamente peligrosas.
- En el año 1984, Yokoyama, Pritchard y Dowell concluyeron que el methomyl era el reemplazo de methamidophos por ser menos peligroso (Yokoyama, Pritchard & Dowell, 1984).

En la literatura no fue posible encontrar relaciones entre otras moléculas que pertenecen al conjunto clausura y frontera de Insecticidas. A pesar de ello, consideramos, posible sugerir la realización de estudios experimentales que puedan corroborar las relaciones de similitud aquí encontradas ente las moléculas y buscando, en lo posible el reemplazo de unas por otras menos peligrosas.

En la figura 20D se observa el interior del subconjunto I, este no tiene elementos, por tal razón no es posible afirmar relación en particular entre sustancias químicas que hacen parte de los Insecticidas.

En la figura 21A y señalas dentro de la línea roja se encuentras las moléculas de Fungicidas estudiadas en este trabajo. En las figuras 21B, 21C y 21D se observa la clausura (sombreado en color amarillo), frontera (sombreado en color verde) e interior (sombreado en color rojo) del subconjunto F respectivamente.

Figura 21. Subconjunto Fungicidas (F)



Fuente: Elaboración propia

De la misma forma que el subconjunto anterior (I), en los Fungicidas el conjunto clausura y frontera (figuras 21B Y 21C) están constituidos por los mismos elementos.

Se consultó en la literatura artículos relacionados con las moléculas de los conjuntos clausura y frontera de Fungicidas y con posibles relaciones entre ellas, y se encontró que:

- En el año 2007, Everitt y Wayne sugirieron que dicamba puede ser reemplazado por 2,4-D en las malezas como *Russian thistle* y *horseweed* en los sistemas de labranza (Everitt & Wayne, 2007), de acuerdo a esta hipótesis no hubo una mejoría, debido a que 2,4D es más peligrosa que dicamba. Otra relación encontrada en el mismo año fue propuesta por Chena, Wub, Elovitzc, Lindenb y Suffeta donde especificaron que molinate era similar a EPTC (Chena, Wub, Elovitzc, Lindenb & Suffeta, 2007) y según la OMS ambas hacen parte de la clasificación II de toxicidad (moderadamente peligroso).

Los conjuntos clausura y frontera de A (figuras 22B y 22C) muestran relaciones entre Acaricidas, Herbicidas, Fungicidas e Insecticidas (es decir que cumplen con la misma función y que por ejemplo un Acaricida puede servir como Herbicida, Fungicida e Insecticida). Con la búsqueda bibliográfica realizada de artículos relacionados con estas moléculas y con posibles relaciones entre ellas, se encontró que:

- En el año 1993, Winder, Dewar y Dunning expusieron que el reemplazo de aldicarb principalmente era por carbofuran (Winder, Dewar & Dunning, 1993), cabe resaltar que carbofuran es menos peligrosa que aldicarb.
- En el año 2018, la Unión Europea prohibió el fipronil y autorizó el reemplazo por methiocarb por ser menos peligrosa (Lentola, Giorio, Bogialli, Roverso, Marzaro, Girolami & Tapparo, 2020).

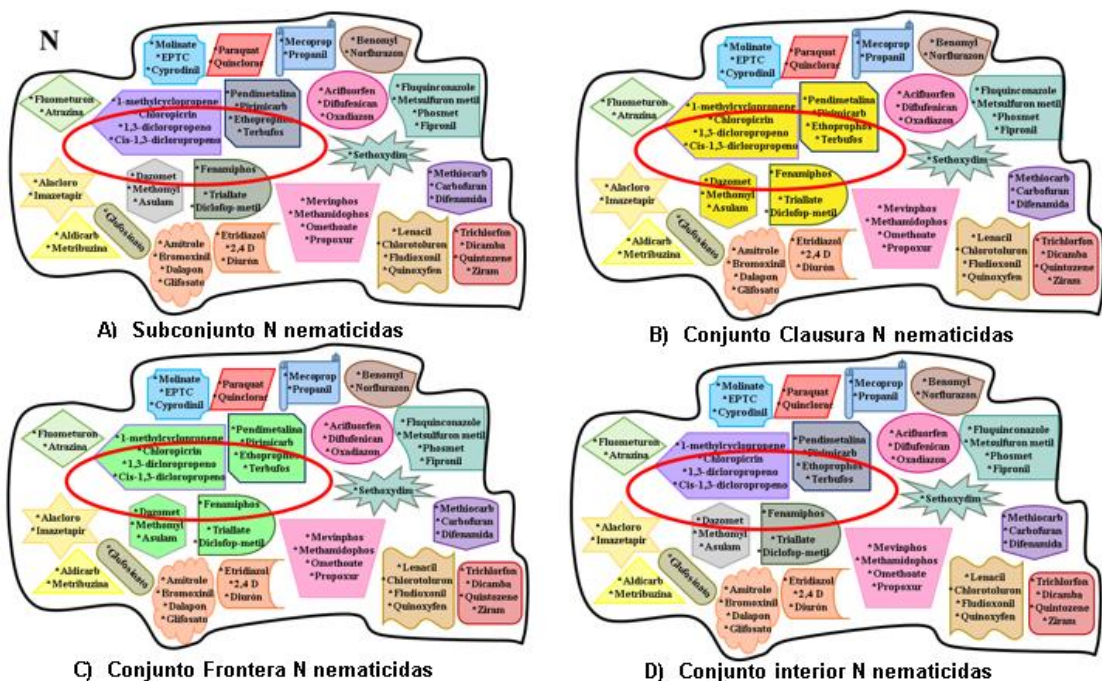
En el conjunto interior de Acaricidas no se encontraron elementos, como se observa en la figura 22D, es decir, que no se puede afirmar una relación entre las moléculas que hacen parte del subconjunto A.

En la figura 23A y señalados dentro de la línea roja se encuentran las moléculas de Nematicidas aquí estudiadas. También, se observa la clausura (sombreado en color amarillo), frontera (sombreado en color verde) e interior (sombreado en color rojo) del subconjunto N.

Los conjuntos clausura y frontera de Nematicidas (N) muestran relaciones entre Nematicidas, Herbicidas e Insecticidas. Por medio de una búsqueda bibliográfica de artículos que relacionen las moléculas de dichos conjuntos, se encontró que:

- En el año 2003, Dungan y Yates realizaron un estudio experimental, en el cual sugirieron que 1,3-dichloropropene era similar al chloropicrin y puede ser el reemplazo la una de la otra (Dungan & Yates, 2003). Cabe resaltar que ambas moléculas hacen parte de la misma clasificación de toxicidad (moderadamente peligroso).
- En el año 2019, Seleem sugirió que methomyl se puede utilizar como sustituto de los compuestos organofosforados como terbufos (Seleem, 2019), resaltando que el methomyl es menos peligroso que terbufos.

Figura 23. Subconjunto Nematicidas (N)



Fuente: Elaboración propia

Finalmente, en el subconjunto Nematicidas, el conjunto interior no tiene elementos, como se observan en la figura 23D, por tal razón no es posible afirmar una relación en particular entre los plaguicidas que hacen parte del subconjunto N.

Este estudio cobra relevancia porque algunas de las relaciones encontradas teóricamente también fueron encontradas de forma experimental (tabla 5), lo cual no tiene un impacto negativo en el ambiente, debido a que los resultados de este trabajo se obtuvieron por medio de una herramienta química matemática, por la cual se encontraron relaciones y probables sustitutos de reemplazo menos peligrosos según la clasificación de toxicidad estipulado por la Organización Mundial de la Salud como se observa en la tabla 5. Llegando así, a conclusiones por medio de la teoría. Además se afirmó que las clasificaciones de los plaguicidas no son robustas y que se encuentran relaciones entre ellas. Por lo cual, se evidencia que los Nematicidas se relacionan con Herbicidas e Insecticidas y los Acaricidas se relacionan con Herbicidas, Fungicidas e Insecticidas, es decir, que cumplen con la misma función.

Tabla 5. Comparación entre los resultados obtenidos en este trabajo y los obtenidos por medio de la literatura

RELACIÓN	LO QUE MUESTRAN LOS RESULTADOS DE ESTE TRABAJO	LO QUE MUESTRAN ESTUDIOS EXPERIMENTALES	IMPORTANCIA AMBIENTAL
Omethoate y Propoxur	De acuerdo con los resultados de la base topológica, las moléculas se relacionan teniendo en cuenta las 15 propiedades fisicoquímicas estudiadas.	El omethoate es similar al propoxur para el control de saltamontes (Fewkes & Greathead, 1978).	El omethoate es menos peligrosa que propoxur.
Pirimicarb y Pendimetalina		La pendimetalina es la alternativa viable para sustituir el pirimicarb en el cultivo de lechuga contra Bluegrass (Steingrimsdottir, Petersen & Fantke, 2018).	Pendimetalina es menos peligrosa que pirimicarb.
1,3D y Chloropicrin		Se encontró que son similares y pueden usarse como sustitutos el uno por el otro en el control de nematodos, hongos y malezas (Dungan & Yates, 2003).	Ambas moléculas hacen parte de la clasificación de moderadamente peligrosas.
Atrazina y Fluometuron	En el conjunto interior de Herbicidas se encontraron que estas moléculas se relacionan, pudiendo ser probablemente sustitutos de reemplazo	La atrazina puede ser sustituida por fluometuron, en cultivos de maíz (Nemat, Hassan & El-Bastawisy, 2007).	Ambas hacen parte de la clasificación de poco probable que presenten un peligro agudo.
Paraquat y Glufosinato		Ambas moléculas son similares para prevenir la propagación de la maleza <i>C. radiat</i> (Hoyos, Guido, Vásquez, Palma, Rojano & De Prada, 2021).	El glufosinato es menos peligroso que el paraquat.
Glifosato y Glufosinato		Se encontró que ambas moléculas tienen funciones similares (Takanoa, Pattersonb, Nissona, Dayana & Gaines, 2019).	El glifosato es menos peligroso que el glufosinato.

Paraquat y Glifosato		Se dijo que el paraquat podía ser sustituido por glifosato en las plantaciones de banano desde un punto de vista ambientalmente (Humbert, Margni, Charles, Torres, Quiro & Jolliet, 2006).	El glifosato es menos peligroso que el paraquat.
Methomyl y Methamidophos	En los conjuntos clausura y frontera de Insecticidas se encontró que ambas moléculas se relacionaban.	El methomyl era el reemplazo de methamidophos por ser menos peligroso (Yokoyama, Pritchard & Dowell, 1984).	Methomyl es menos peligroso que methamidophos.
Cyprodinil y Fludioxonil	En los conjuntos clausura y frontera de Fungicidas se encontró que las moléculas presentan relacionen de similitud entre ellas.	Ambas moléculas son similares para el control de hongos en el campo de los arándanos (Munitz, Resnik, Montti & Medina, 2016).	Fludioxonil es menos peligroso que cyprodinil.
Aldicarb y Carbofuran	En los conjuntos frontera y clausura del subconjunto de Acaricidas se encontró que estas moléculas se relacionan teniendo en cuenta las propiedades fisicoquímicas estudiadas.	Se expuso que el reemplazo de aldicarb era principalmente por carbofuran (Winder, Dewar & Dunning, 1993).	Carbofuran es menos peligroso que aldicarb.
Fipronil y Methiocarb		La Unión Europea prohibió el fipronil y autorizó el reemplazo por methiocarb (Lentola, Giorio, Bugialli, Roverso, Marzaro, Girolami & Tapparo, 2020).	Methiocarb es menos peligroso que fipronil.
Methomyl y Terbufos	En el conjunto clausura y frontera de Nematicidas estas dos moléculas tienen relaciones de similitud, teniendo en cuenta las propiedades estudiadas.	El methomyl se puede usar como sustituto de terbufos (Seleem, 2019).	Methomyl es menos peligroso que terbufos.

Fuente: Elaboración propia

Es importante destacar que resultados de este trabajo serán divulgados en el 34° Congreso Latinoamericano de Química CLAQ 2020 (En el Anexo Ñ mostramos la carta de aceptación de la ponencia en octubre de 2021). Además se tiene un borrador con resultados preliminares del artículo, pero todavía no se ha sometido a evaluación debido a que el proyecto FODEIN finaliza en enero del 2022.

IMPACTO SOCIAL Y HUMANÍSTICO

Desde esta propuesta investigativa, se buscó encontrar posibles sustitutos de reemplazo de plaguicidas menos peligrosos pero que cumplan con la misma función, es por ello, que a partir del análisis de agrupamientos y del estudio de las propiedades topológicas se evalúan similitudes entre moléculas.

Además, cabe resaltar la importancia que tiene la quimiotopología, ya que esta permite relacionar conjuntos, con el fin de encontrar objetos que compartan características similares (Mesa, Restrepo & Villaveces, 2008).

A partir de esto, se realizó un trabajo investigativo y teórico, que no requirió de muestras ni manipulación de plaguicidas. Por lo que, no se presentaron reacciones químicas que pudieran generar una dispersión de partículas en el ambiente. Asimismo, no se afectó la salud de las personas. Por lo tanto, este trabajo no tiene un impacto negativo en el medio ambiente, ni efectos en la salud de las personas.

Es importante resaltar que según la Organización Mundial de la Salud los plaguicidas causan un millón de intoxicaciones y alrededor de 20.000 muertos anualmente (Guzmán, Guevara, Olguín & Mancilla, 2016). Por lo tanto, los resultados de esta investigación son relevantes porque: 1) se confirmaron sustitutos de reemplazo menos peligrosos teniendo en cuenta la clasificación de toxicidad de la Organización Mundial de la Salud, por medio de una búsqueda bibliográfica y 2) se encontraron posibles sustitutos de reemplazo menos peligrosos. De esta manera, se pueden plantear nuevas investigaciones que corroboren los resultados estipulados en este trabajo y así se puedan disminuir los efectos adversos generados por plaguicidas altamente contaminantes, utilizados en la cotidianidad.

CONCLUSIONES

Teniendo en cuenta la investigación previa y lo propuesto por Villaveces, de que la química es una ciencia y que su objeto de estudio es el conjunto de todas las sustancias químicas, se estudiaron 60 moléculas plaguicidas como un conjunto, y se encontró que entre ellas existen relaciones de vecindad y que algunas de estas relaciones han sido estudiadas previamente.

La literatura clasifica las moléculas plaguicidas dentro de grupos o familias disyuntas y particulares o robustas como son los Herbicidas, los Insecticidas, los Fungicidas, los Acaricidas, y los Nematicidas. Esta clasificación basada en el modo de acción no refleja ninguna relación o semejanza que pueda existir entre las moléculas de uno u otro grupo o familia. Sin embargo, los resultados topológicos de los 5 subconjuntos aquí estudiados muestran que existen relaciones de vecindad entre los Herbicidas, los Nematicidas, los Acaricidas, los Fungicidas y los Insecticidas.

Ninguno de estos 5 subconjuntos son grupos robustos, en el sentido de que están autocontenidos y no se relacionan con moléculas de otros grupos o familias. Estas moléculas se agrupan entre sí en el 100% de los análisis de agrupamientos realizados; sus conjuntos interiores están conformados por sus mismos elementos como es el caso de los Herbicidas, y todos los conjuntos interior, excepto el de los Herbicidas, son conjuntos vacíos.

Adicionalmente, se encontraron relaciones de similitud entre la Pendimetalina, ethoprophos, terbufos, pirimicarb, un Herbicida, dos Nematicidas y un Insecticida respectivamente, y entre el 1,3-dicloropropeno, Chloropicrin y 1-methylcyclopropene, dos Nematicidas y un Insecticida respectivamente. Así como entre el paraquat, glifosato y glufosinato, y la atrazina y el fluometuron. También, se encontraron relaciones que no han sido estudiadas previamente como las existentes entre: 1) Difenamida, methiocarb y carbofuran, 2) EPTC, molinate y cyprodinil, 3) Chlorotoluron, lenacil, fludioxonil, quinoxifen, 4) Metribuzina y aldicarb, 5) 2,4 D, diuron y etridiazol. 6) Diclofop-metil, triallate y fenamiphos, 7) Norflurazon y benomyl. 8) Asulam, dazomet, methomyl. 9) Metsulfuron-metil, fluquinconazole, fipronil y phosmet. 10) Dicamba, trichlorfon, quintozone y ziram.

Es por esto, que en los resultados se evidencian las relaciones entre moléculas pudiendo ser posibles sustitutos de reemplazo. También se tuvo en cuenta la clasificación de toxicidad de los plaguicidas según lo estipulado por la Organización Mundial de la Salud, en donde al tener una mayor categoría de toxicidad se ve

mayormente afectado el medio ambiente y la salud de las personas. De tal manera, las relaciones encontradas en este trabajo confirman estudios experimentales (ver tabla 5) y a su vez pueden servir para proponer posibles sustitutos de reemplazo que permitan, en lo posible, mitigar el impacto que generan estas sustancias en el ambiente y en la población. Mostrando la importancia de esta investigación teórica.

Adicionalmente, los resultados también muestran que las moléculas plaguicidas no pueden ser consideradas como moléculas aisladas que hacen parte de una familia o grupo particular, sino que deben ser estudiadas de forma conjuntista. Una visión de conjunto de estas moléculas permite afirmar que entre estas existen relaciones químicas que las conectan y relaciones de similitud.

RECOMENDACIONES

- Se sugiere hacer un análisis experimental para comprobar si existe una relación entre los siguientes agrupamientos: {amitrole, bromoxinil, dalapon y glifosato}, {acifluorfen, diflufenican, oxadiazon}, {mecoprop, propanil}, {paraquat, quinclorac} y {alacolor, imazetapir}, {difenamida, methiorcarb, carbofuran}, {EPTC, molinate, cyprodinil}, {chlorotolorun, lenacil, fludioxonil, quinoxifen}, {metribuzina, aldicarb}, {2,4D, diuron, etridiazol}, {diclofop-metil, triallate, fenamiphos}, {norflurazon, benomyl}, {asulam, dazomet, mathomyl}, {metsulfuron-metil, fluquinconazole, fipronil, phosmet}, {dicamba, trichlorfon, quintozene, ziram} dado que hasta el momento no ha sido encontrado en la literatura.

Del mismo modo, se propone realizar estudios experimentales de las relaciones que no están reportadas en la literatura y que se encuentran en los conjuntos clausura y frontera de los 5 subconjuntos estudiados, además de otras relaciones del conjunto interior de Herbicidas.

- Retomar los resultados de este estudio e investigar nuevas relaciones con probables reemplazos entre ethoprophos y terbufos, teniendo en cuenta que ambas moléculas son extremadamente peligrosas según la Organización Mundial de la Salud.
- Analizar lo propuesto por Everitt y Wayne en el año 2007, teniendo en cuenta que el reemplazo de dicamba por 2,4-D no es una posible sustitución aceptable ambientalmente, considerando que 2,4D es más peligroso que dicamba.

REFERENCIAS

- Aballay, E., & Insunza, V. (2002). Evaluación de plantas con propiedades nematocidas en el control de xiphinema index en vid de mesa cv. Thompson seedless en la zona central de Chile. *Agricultura técnica (Chile)*, volumen 62(3), pp. 357-365.
- AgroTerra. (2020, Octubre 20). Herbicidas, clasificación y uso. AgroAvances de <https://agroavances.com/sabiasque-detalle.php?idSab=491>
- Amigo, J., Falcó, A., Gálvez, J., & Villar, V. (2007). Topología molecular. *Boletín de la Sociedad Española de Matemática Aplicada*, volumen 39, pp. 135-149.
- Bolzonella, C., Lucchetta, M., Teo, G., Boatto, V. & Zanella, A. (Octubre, 2019). Is there a way to rate insecticides that is less detrimental to human and environmental health? *Global Ecology and Conservation*, volume 20, pp. 1-9.
- Cardenas, O., Silva, E., Morales, L., & Ortiz, J. (2005). Estudio epidemiológico de exposición a plaguicidas organofosforados y carbamatos en siete departamentos colombiano. *Redalyc*, 25(2), pp. 170-180.
- Chena, R., Wub, C., Elovitzc, M., Lindenb, K., & Suffeta, M. (2007, Julio 29). Reactions of thiocarbamate, triazine and urea herbicides, RDX and benzenes on EPA Contaminant Candidate List with ozone and with hydroxyl radicals. *Water research*, volumen 42, pp. 137– 144.
- Cobos, V., Barrientos, R & Chi Novel, C. (2011). Los plaguicidas y su impacto sobre la fauna silvestre de la Península de Yucatán. *Bioagrobiencias*, Vol. 4. No. 2.
- Cornejo, P. (s.f.). Propiedades del benceno y sus usos en la industria. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo de <https://www.uaeh.edu.mx/scige/boletin/prepa3/n7/m7.html>
- DANE. (s.f.). Serie Nacional de población por área, para el periodo 2018 – 2070. DANE de <https://www.dane.gov.co/index.php/estadisticas-por-tema/demografia-y-poblacion/proyecciones-de-poblacion>
- Devine, J., Eza, D., Ogusuku, E & Furlong, M. (2008). Uso de insecticidas: contexto y consecuencias ecológicas. *Revista Peruana De Medicina Experimental Y Salud Publica*, volumen 25, pp. 74-100.
- Dungan, R. & Yates, S. (2003). Degradation of Fumigant Pesticides: 1, 3-Dichloropropene, Methyl Isothiocyanate, Chloropicrin, and Methyl Bromide. *Vadose Zone Journal*, volumen 2, pp. 279–286.

Everitt, D., & Wayne J. (2007). Weed Control and Cotton (*Gossypium Hirsutum*) Response to Preplant Applications of Dicamba, 2, 4-d, and Diflufenzopyr Plus Dicamba. *Weed Science Society of America*, volume 21(2), pp. 506-510.

FAO. (1997, Noviembre). Anexo 1 - inventario de plaguicidas. FAO de <http://www.fao.org/3/W2598S/w2598s09.htm>

FAO. (s.f.). Capítulo 1. Introducción. FAO de <http://www.fao.org/3/w1604s/w1604s04.htm>

Fernández, D., Mancipe, L., & Fernández, D. (2010, Junio 15). Intoxicación por organofosforados. *Revista Med*, volumen 18, pp. 84-92.

Ferrer, A. (2003). Intoxicación por plaguicidas. *Anales Del Sistema Sanitario De Navarra*, volumen 26, pp. 155-172.

Fewkes, D., & Greathead, D. (1978). Progress towards the Integrated Control of Sugar Cane Pests. *Pestic. Sci*, volumen 9, pp. 445-457.

Guzmán, P., Guevara, R., Olguín, J. & Mancilla, O. (2016, Junio). Perspectiva campesina, intoxicaciones por plaguicidas y uso de agroquímicos. *IDESIA (Chile)*, volumen 34, pp. 69-80.

Hoyos, V., Guido, P., Vázquez, J., Palma, C., Rojano, A., & De prada, R. (2021, Marzo 6). Confirmation of Multiple Resistant *Chloris radiata* Population, Harvested in Colombian Rice Fields. *Agronomy 2021*, volumen 11(3), pp. 496.

Humbert, S., Margni, M., Charles, R., Torres, O., Quiro, A., & Jolliet O. (2006, Junio 21). Toxicity assessment of the main pesticides used in Costa Rica. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, volumen 118, pp. 183–190.

INSHT. (1983). NTP 143: Pesticidas: Clasificación y riesgos principales. INSHT de https://www.insst.es/documents/94886/326801/ntp_143.pdf/54a0980e-efd8-4f24-ac14-9471a5409745

Lentola, A., Giorio, C., Bogialli, S., Roverso, M., Marzaro, M., Girolami, V., & Tapparo, A. (2020, Septiembre 25). Methiocarb metabolites are systemically distributed throughout corn plants grown from coated seeds. *Environmental Chemistry Letters*, volumen 19, pp. 1887–1892.

Lerro, C., Beane, L., DellaValle, C., Andreotti, G., Hofmann, J., Koutros, S., Parks, C., Shrestha, S., Alavanja, M., Blair, A., Lubin, J., Sandler, D & Ward, M. (2021, Enero). Pesticide exposure and incident thyroid cancer among male pesticide applicators in agricultural health study. *Environment International*, Volume 146.

Lezaun, J. (2016, Abril). ¿Cuál es el impacto económico de los “Nematodos fitoparásitos? CropLife Latin America de <https://www.croplifela.org/es/plagas/listado-de-plagas/nematodos-fitoparasitos>.

Mclibre. (2016, Mayo 13). Demostraciones de fórmulas matemáticas. Mclibre de <https://www.mclibre.org/consultar/informatica/matematicas/formulas-demostraciones.html>

Mesa, H., Restrepo, G., & Villaveces, J. (2008). On dendrograms and topologies. *Systematic Zoology*, volumen 20, pp. 371-384.

Mohamed, A., & Ahmed, E. (2020). Pesticides pollution: Classifications, human health impact, extraction and treatment techniques. *Egyptian Journal of Aquatic Research*, 46(3), 207-220. doi:10.1016/j.ejar.2020.08.007.

Munitz, M., Resnik, S., Montti, M., & Medina M. (2016, abril 29). Occurrence of fungicide residues on Argentinean blueberry fruit and juice samples. *SDRP Journal of Food Science & Technology*, volumen 1, pp. 1-5.

Nemat, M., Hassan, M., & El-Bastawisy, M. (2007, Junio 22). Differential influence of herbicide treatments on activity and kinetic parameters of C₄ photosynthetic enzymes from Zea mays. *Pesticide Biochemistry and Physiology*, volumen (89), pp. 198-205.

Núñez, A. (1998). El óptimo económico del uso de agroquímicos en la producción de palma africana [archivo PDF]. Recuperado de https://digitalrepository.unm.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=1467&context=abya_y_ala

O, Luis. (2011). Espacios métricos [archivo PDF]. Recuperado de <https://www.fceia.unr.edu.ar/~fismat2/apuntes/apun3-fismat2.pdf>

Osuna, J., Pérez, M., Vásquez, V & Gómez, R. (2011, Julio 19). Aplicación de 1-metilciclopropano (1-MCP) y su efecto en ciruela mexicana (*Spondias purpurea* L.). *Fitotecnia mexicana*, volumen 34, pp.197 – 204.

OMS. (2018, Febrero 19). Residuos de los plaguicidas en los alimentos. OMS de <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/pesticide-residues-in-food>.

Perea, J. (s.f.). Análisis Clúster. Universidad de Córdoba de http://www.uco.es/zootecnia-y-gestion/img/pictorex/09_13_25_sesion_8.pdf

Prieto, D. (2018). Causas Y Consecuencias De Las Problemáticas Actuales En La Gestión De Envases Plaguicidas De Uso Agrícola En Cundinamarca [archivo PDF]. Recuperado de

<https://repository.uamerica.edu.co/bitstream/20.500.11839/6919/1/5121873-2018-II-GA.pdf>

Quintero, N., Restrepo, G., & Cohen, I. (2013). Chemotopological study of positron emitter radionuclides used in PET diagnostic imaging: physical, physico-chemical, dosimetric, quantum and nuclear properties. *J Radioanal Nucl Chem*, volumen 295, pp. 823–833.

Rainforest Alliance. (2017, Julio). Lista de Plaguicidas Prohibidos y de Uso con Mitigación de Riesgo [archivo PDF]. Recuperado de https://www.rainforest-alliance.org/business/wp-content/uploads/2017/11/02_lists-pesticides-management_sp.pdf

Ramírez, L. (2018). Exposición a agroquímicos en trabajadores de un cultivo de flores de la sabana de Bogotá. [Tesis de pregrado]. Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales, Bogotá.

Raynald Levesque and IBM Corp (2011), Programming and Data Management for IBM SPSS Statistics 20: A Guide for IBM SPSS Statistics and SAS Users, Copyright IBM Corporation 1989.

Restrepo, G. (2005). Química matemática y la universidad de Pamplona. *Revista de la Facultad de Ciencias Básicas*, volumen 3, pp. 61-76.

Restrepo, G., Mesa, H., Llanos, E. & Villaveces, J. (2004). Topological Study of the Periodic System. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, volumen 44, pp. 68-75.

Restrepo, G., Villaveces, J., & Mesa, H. (2005, Diciembre 30). On the Topological Sense of Chemical Sets. *Journal of Mathematical Chemistry*, Volumen 39, pp. 363-376.

Robertson, L., Allsopp, P., Chandler, K., & Mullins, R. (1995). Integrated Management of Canegrubs in Australia: Current Situation and Future Research Directions. *Aust. J. Agric. Res*, volumen 46, pp. 1-16.

Rodríguez, B. (2021). Estudio quimi-topológico de 25 herbicidas químicos regulados por el Instituto Colombiano Agropecuario [Tesis de maestría]. Universidad Santo Tomás, Bucaramanga.

Sánchez, P., Osorio, R., Hernández, L., Hernández, V., Márquez, C., & De la Cruz, E. (2017). Toxicity of acaricides to the red palm mite *Raoiella indica* (Acari: tenuipalpidae). *Agrociencia*, volumen 51, pp. 81-90.

Santamaría, L., & Ureta, J. (2014). ¿Qué son los funguicidas? *McGrath, M.T.*

Seleem, A. (2019, Julio 11). Induction of hyperpigmentation and heat shockprotein 70 response to the toxicity of methomylinsecticide during the organ development of theArabian toad, *Bufo arabicus* (Heyden, 1827). *Journal of histotechnology*, 1-12.

Silveira, M., Aldana, M., Santana, J., Valenzuela, A., Jasa, G & Rodríguez, G. (2018, Febrero). Plaguicidas agrícolas: un marco de referencia para evaluar riesgos a la salud en comunidades rurales en el estado de sonora, México. *Revista internacional de contaminación ambiental*, volumen 34, pp. 7-21.

Steingrímssdóttir, M., Petersen, A., & Fantke, P. (2018, Mayo 2). A screening framework for pesticide substitution in agriculture. *Journal of Cleaner Production*, volumen 192, pp. 306-315.

Takanoa, K., Pattersonb, L., Nissena, J., Dayana, E., & Gaines, A. (2019, Mayo 17). Predicting herbicide movement across semi-permeable membranes using three phase partitioning. *Pesticide Biochemistry and Physiology*, volumen 159, pp. 22-26.

Topaz, T., Egozi, R., Suari, Y., Ben-Ari, J., Sade, T., Chefetz, B & Yahel, G. (Junio, 2020). Environmental risk dynamics of pesticides toxicity in a Mediterranean micro-estuary. *Environmental pollution*, Volume 265.

Trujillo, D., Ramírez, M., Rodríguez, J. & Uribe, E. (2016, Abril). A DFT-chemotopological study on the 3D transition metal oxides and dioxygen complexes. *Chemical Physics Letters*, volumen 649, pp. 103-110.

Uribe, E. (2005). Estudio Teórico De Los Monohidruros Del Cuarto Periodo. [Tesis de pregrado]. Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga.

Uribe, E. (2011). Quimiotopología De Las Interacciones Entre Elementos Del Cuarto Periodo Y El Hidrógeno. Estructura Y Enlace Químico [Tesis de doctorado]. Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga.

Uribe, E., Ramírez, M. & Trujillo, D. (2020). Estudio teórico y quimiotopológico de sustancias químicas TMO_n (TM=Sc-Zn y n=1-4).

Valerín, M. (1993). Guía de uso de fungicidas el combate de enfermedades de las plantas [archivo PDF]. Recuperado de <http://www.mag.go.cr/bibliotecavirtual/H2O-10387.pdf>

Villaveces, J. (s.f.). La Tabla Periódica: un microscopio para ver el interior del átomo [archivo PDF]. Recuperado de <https://cedetrabajo.org/wp-content/uploads/2012/08/29-3.pdf>

Winder, G., Dewar, A., & Dunning, R. (1993). Comparisons of granular pesticides for the control of soil-inhabiting arthropod pests of sugar beet. *Crop protection, volumen 12, pp. 148-154.*

World Health Organization, (2019). The WHO recommended classification of pesticides by hazard and guidelines to classification 2019.

World Health Organization. (2019). *The WHO recommended classification of pesticides by hazard and guidelines to classification 2019*. WHO. Retrieved from <https://apps.who.int/iris/bitstream/handle/10665/332193/9789240005662-eng.pdf>

Yokoyama, V., Pritchard, J., & Dowell, A. (1984). Laboratory Toxicity of Pesticides to *Geocoris pallens* (Hemiptera: Lygaeidae), a Predator in California Cotton. *J. Econ. Entomol, volumen 77, pp. 10-15.*

ANEXOS

ANEXO A. Datos de las propiedades fisicoquímicas

- Propiedades experimentales

NOMBRE	Peso molecular (g/mol)	Densidad (g/cm ³)	Punto de ebullición (°K) a 760 mmHg	Punto de inflamación (°K)	Solubilidad en agua (mg/L)	Presión de vapor (Pa) a 25°C	Temperatura fusión (°K)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Toxicología DL50 (mg/Kg) ORAL - RATAS	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol a 25°C)
1-methylcyclopropane	54	1	7	-99	725.8	75992.40	373.15	2.03	2500	0.00000045
Amitrole	84.08	1.59	244.90	101.90	280000	0.0000587	432.15	-0.86	5000	0.00000002
Chlorotoluron	212.68	1.22	367.80	176.20	70	0.000006	421.25	2.41	5800	0.00001459
Cyprodinil	225.29	1.21	405.99	199.33	13	0.000491	349.05	4.00	2000	0.00850117
Fludioxonil	248.18	1.55	420.40	208	1.80	0.000000	472.95	4.12	5000	0.00005390
Fluometuron	232.20	1.39	323.70	149.60	110	0.000125	437.15	2.42	1450	0.00026446
Mecoprop	214.64	1.28	331.90	154.50	620	0.001600	367.65	3.13	650	0.00184412

Methomyl	162.21	1.30	144	18	58000	0.000720	351.15	0.60	14.70	0.0000 0200
Molinate	187.30	1.06	279	122.60	970	0.746603	297.15	3.21	369	0.4154 3250
Oxadiazon	345.22	1.31	417	206	0.70	0.000017	363.15	4.80	3500	0.0073 6633
Quinoxifen	308.13	1.43	423.20	209.70	0.00	0.000020	379.85	4.66	5000	0.0009 7779
Tri-allate	304.66	1.27	322.10	148.60	4	0.015999	302.15	4.60	800	1.2159
Ziram	305.84	1.70	129.40	93.30	65	0.000018	523.15	1.23	267	0.0000 6272
Trichlorfon (O,O- dimethyl phosphonic ester)	257.43	1.57	269.30	116.70	120000	0.001300	350.15	0.51	250	0.0000 0172
Ethoprophos	242.34	1.11	310.20	141.40	750	0.050662	260.15	3.59	33	0.0164 1465
Fenamiphos	303.36	1.15	375.60	181	329	0.000133	322.15	3.23	6	0.0001 2260
Fipronil	437.15	1.87	510.10	262.30	1.90	0.000000	473.65	4.00	100	0.0000 8532
Fluquinconazole	376.17	1.63	623	330.60	1	0.000000	465.15	3.24	112	0.0000 0209
Pirimicarb	238.29	1.21	373.40	179.60	2700	0.000971	363.65	1.70	142	0.0000 8562
Omethoate	213.19	1.27	313.30	100	1000000	0.004133	245.15	-0.74	25	0.0000 0000

Aldicarb	190.27	1.08	100	100	6030	0.004840	372.15	1.13	0.50	0.0001 4591
Carbofuran	221.25	1.20	313.30	143.30	351	0.000072	424.15	2.32	5	0.0003 1309
cis-1,3 dicloropropeno	110.97	1.18	108.40	27.80	2.70	4382961	223.15	2.06	470	274.59 1
Mevinphos	224.15	1.22	243.40	115.10	1000000	4.31	294.15	0.13	3	0.0003 9415
Benomyl	290.32	1.28	140	0	3.80	0.0000005	413.15	2.12	10000	0.0000 0050
Methamidophos	141.13	1.29	208.70	212	1000000	0.0047063	319.15	-0.80	7.50	0.0000 8795
Methiocarb	225.31	1.14	310.70	141.70	27	0.0789266	393.15	2.92	13	0.0001 1956
Dazomet	162.3	1.30	222.30	88.20	3000	0.0004666	379.15	1.40	520	0.0000 5046
Chloropicrin	164.37	1.79	112.22	13	1620	3200	209.15	2.09	250	207.71 6
1,3- dicloropropeno	110.97	1.20	103.89	35	2800	4533	223.15	2.04	470	359.70 4
Terbufos	288.4	1.11	319.60	87.80	5.07	0.083726	244.15	4.48	1.60	2.4318 0000
Etridiazol	247.5	1.50	254.7	107.8	117	3.639691	293.05	3.37	1.08	0.0281 6835
Quintozene	295.3	1.72	328	11	0.44	0.008333	417.15	4.64	1.10	4.4785 6500
Propoxur	209.24	1.08	295.4	132.5	700000	0.203983	360.15	1.52	41.0	0.0001 4489
Phosmet	317.3	1.47	412.6	203.3	24.4	0.000065	345.15	2.78	92.5	0.0008 4910

2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético)	221	1.42	160	160	336.2	0.371968	410.15	2.81	347	0.00000018
Acifluorfen	361.65	1.57	422.40	209.20	240	0.000525	430.15	3.70	1370	0.00000000
Alacloro	269.77	1.12	100	198.10	18.07	0.273310	314.15	3.52	930	0.00000040
Asulam	230.24	1.42	383	0	2527	0.018532	417.15	0.27	2000	0.00000000
Atrazina	215.68	1.3	280	176.70	214.1	0.381301	443.15	2.61	672	0.00000004
Bromoxinil	276.91	2.2	265.60	114.40	43.87	0.030797	462.15	3.39	190	0.00000002
Dalapón	142.97	1.39	187	110	7432	89.33	439.15	1.68	9339	0.00001696
Dicamba	221.03	1.57	326.10	151	440.5	0.705273	381.15	2.21	1039	0.00000003
Diclofop-metil	341.2	1.31	438.50	150.30	0.7937	0.009199	310.15	4.62	512	0.00000004
Difenamida	239.31	1.2	381.97	173.30	98.35	0.057995	407.15	2.86	685	0.00000001
Diflufenican	394.3	1.44	376.20	181.30	0.2171	0.000053	433.15	4.90	2000	0.00000001
Diuron	233.09	1.48	181	186.70	150.6	0.061995	429.15	2.68	1017	0.00000001

EPTC (S-etil dipropiltiocarbama to)	189.32	0.95	232	116	89.87	0.5012922	297.15	3.21	916	0.0000 1042
Glifosato	169.07	1.74	465.80	235.50	12000	0.0000006	502.15	-4.00	5600	0.0000 0000
Glufosinato	181.13	1.4	519.10	267.70	1370000	0.0000015	487.15	-3.96	2000	0.0000 0000
Imazetapir	289.33	1.28	180	224	84.54	0.0000000	447.15	2.60	5000	0.0000 0000
Lenacil	234.29	1.32	376	202.40	66.64	0.0000000	588.15	3.09	11000	0.0000 0000
Metribuzina	214.29	1.28	132	142.70	1304	0.0689275	397.15	1.70	1100	0.0000 0000
Metsulfuron Metil	381.36	1.47	647.20	345.20	52.75	0.0000000	431.15	2.20	5000	0.0000 0000
Norflurazon	303.67	1.44	345.20	162.60	126.9	0.0049729	447.15	2.30	8000	0.0000 0000
Paraquat	186.25	1.56	310.75	0	395.2	0.0330640	573.15	2.47	100	0.0000 0015
Pendimetalina	281.31	1.17	330	208.40	89.68	0.0000000	327.15	2.62	1050	0.0000 0000
Propanil	218.08	1.25	369	177.50	84.18	0.0037597	364.15	3.07	367	0.0000 0010
Quinclorac	242.05	1.75	405	200.20	76.02	0.0000053	547.15	2.97	2190	0.0000 0000
Sethoxydim	327.5	1.11	437.02	215	1.54	0.0000015	362.15	4.38	3200	0.0000 0000

- Propiedades teóricas

NOMBRE	Energía total [KCal/Mol]	Energía térmica [KCal/Mol]	Capacida d calorífica [KCal/Mol -Kelvin]	Entropía [KCal/M ol- Kelvin]	Momento dipolar (Debye)
1- methylcyclopropene	-97847.63	54.67	0.016	0.069	0.8968
Amitrole	-186765.80	50.03	0.019	0.072	3.68
Chlorotoluron	-648713.56	143.26	0.055	0.127	3.73
Cyprodinil	-443492.69	171.37	0.060	0.128	2.10
Fludioxonil	-577654.33	107.48	0.055	0.125	4.00
Fluometuron	-547194.99	135.26	0.058	0.137	4.73
Mecoprop	-673657.09	127.55	0.053	0.122	3.42
Methomyl	-536295.15	103.95	0.044	0.118	5.20
Molinate	-553043.39	165.42	0.050	0.117	2.54
Oxadiazon	-1153325.73	206.25	0.086	0.165	1.37
Quinoxifen	-1083427.39	127.63	0.063	0.137	2.55
Tri-allate	-1442833.74	166.31	0.071	0.155	3.86
Ziram	-2332680.57	123.88	0.057	0.141	0.0065

Trichlorfon (O,O-dimethyl phosphonic ester)	-1367971.80	91.26	0.053	0.130	1.15
Ethoprophos	-1006808.41	177.72	0.065	0.147	1.80
Fenamiphos	-959218.06	222.81	0.085	0.171	3.42
Fipronil	-1676380.41	113.14	0.089	0.183	9.02
Fluquinconazole	-1244791.59	146.94	0.077	0.153	1.40
Pirimicarb	-501687.97	191.38	0.070	0.152	2.70
Omethoate	-811364.15	124.57	0.054	0.133	4.82
Aldicarb	-585623.71	140.13	0.055	0.130	3.33
Carbofuran	-468599.37	166.02	0.061	0.130	2.51
cis-1,3 dicloropropeno	-650746.70	42.14	0.019	0.079	2.10
Mevinphos	-669766.52	139.61	0.060	0.140	2.53
Benomyl	-620638.77	208.01	0.078	0.156	6.98
Methamidophos	-643693.48	76.68	0.035	0.100	2.10
Methiocarb	-647326.77	160.18	0.062	0.137	3.94
Dazomet	-691741.92	101.34	0.037	0.099	5.74
Chloropicrin	-1018894.26	16.99	0.024	0.090	1.76
1,3-dicloropropeno	-650746.70	42.04	0.019	0.079	1.86

Terbufos	-1281318.94	197.25	0.077	0.162	2.20
Etridiazol	-1353482.59	71.39	0.045	0.117	5.98
Quintozene	-1715970.02	41.26	0.046	0.120	2.45
Propoxur	-444678.69	162.03	0.059	0.131	2.55
Phosmet	-1204687.42	150.47	0.072	0.154	7.14
2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético)	-912698.060	86.17	0.045	0.115	3.96
Acifluorfen	- 1084509.000	132.83	0.078	0.164	3.70
Alacloro	-759832.920	208.76	0.073	0.152	5.19
Asulam	-702446.780	123.63	0.057	0.126	5.56
Atrazina	-657158.440	150.47	0.054	0.124	5.30
Bromoxinil	- 3480298.120	57.03	0.037	0.104	3.86
Dalapón	-745183.940	48.57	0.027	0.089	3.09
Dicamba	-912694.650	86.14	0.046	0.114	0.64
Diclofop-metil	- 1154207.380	177.94	0.079	0.163	5.32
Difenamida	-470560.350	189.73	0.065	0.139	3.56
Diflufenican	-934926.510	179.07	0.090	0.176	3.01
Diuron	-912428.090	120.09	0.053	0.127	5.86

EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato)	-553802.650	178.63	0.057	0.131	2.16
Glifosato	-559393.690	88.55	0.042	0.110	2.36
Glufosinato	-561512.660	121.83	0.050	0.120	2.12
Imazetapir	-610573.290	213.87	0.081	0.158	5.10
Lenacil	-480813.810	194.58	0.060	0.123	3.98
Metribuzina	-631042.170	148.69	0.059	0.124	2.25
Metsulfuron Metil	- 1045316.060	200.89	0.094	0.183	4.39
Norflurazon	-917358.790	133.68	0.066	0.140	8.50
Paraquat	-938436.690	157.94	0.061	0.136	3.59
Pendimetalina	-609825.180	208.96	0.079	0.153	2.39
Propanil	-877694.690	108.29	0.046	0.112	3.94
Quinclorac	-947307.080	87.45	0.047	0.114	2.96
Sethoxydim	-843232.720	287.58	0.098	0.188	7.02

ANEXO B. Datos de las propiedades fisicoquímicas normalizados

- Propiedades experimentales

NOMBRE	Peso molecular (g/mol)	Densidad (g/cm ³)	Punto de ebullición (°K) a 760 mmHg	Punto de inflamación (°K)	Solubilidad en agua (mg/L)	Presión de vapor (Pa) a 25°C	Temperatura fusión (°K)	coeficiente de partición de octanol agua (Log KOW)	Toxicología a DL50 (mg/Kg) ORAL - RATAS	Ley de Henry (Pa·m ³ /mol a 25°C)
1-methylcyclopropane	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.017	0.433	0.678	0.227	0.000
Amitrole	0.078	0.610	0.372	0.452	0.204	0.000	0.588	0.353	0.455	0.000
Chlorotoluron	0.414	0.374	0.564	0.620	0.000	0.000	0.560	0.720	0.527	0.000
Cyprodinil	0.447	0.368	0.623	0.672	0.000	0.000	0.369	0.899	0.182	0.000
Fludioxonil	0.507	0.585	0.646	0.691	0.000	0.000	0.696	0.912	0.455	0.000
Fluometuron	0.465	0.483	0.495	0.560	0.000	0.000	0.602	0.721	0.132	0.000
Mecoprop	0.419	0.413	0.508	0.571	0.000	0.000	0.418	0.801	0.059	0.000
Methomyl	0.282	0.425	0.214	0.263	0.042	0.000	0.375	0.517	0.001	0.000
Molinate	0.348	0.272	0.425	0.499	0.001	0.000	0.232	0.810	0.034	0.001
Oxadiazon	0.760	0.432	0.641	0.687	0.000	0.000	0.406	0.989	0.318	0.000
Quinoxifen	0.663	0.508	0.650	0.695	0.000	0.000	0.450	0.973	0.455	0.000
Tri-allate	0.654	0.406	0.492	0.557	0.000	0.000	0.245	0.966	0.073	0.003
Ziram	0.657	0.681	0.191	0.433	0.000	0.000	0.828	0.588	0.024	0.000

Trichlorfon (O,O-dimethyl phosphonic ester)	0.531	0.598	0.410	0.486	0.088	0.000	0.372	0.507	0.023	0.000
Ethoprophos	0.491	0.304	0.474	0.541	0.001	0.000	0.135	0.853	0.003	0.000
Fenamiphos	0.651	0.330	0.576	0.630	0.000	0.000	0.298	0.812	0.001	0.000
Fipronil	1.000	0.789	0.786	0.813	0.000	0.000	0.698	0.899	0.009	0.000
Fluquinconazole	0.841	0.636	0.962	0.967	0.000	0.000	0.675	0.813	0.010	0.000
Pirimicarb	0.481	0.368	0.572	0.627	0.002	0.000	0.408	0.640	0.013	0.000
Omethoate	0.415	0.406	0.479	0.448	0.730	0.000	0.095	0.366	0.002	0.000
Aldicarb	0.356	0.285	0.146	0.448	0.004	0.000	0.430	0.576	0.000	0.000
Carbofuran	0.436	0.361	0.479	0.545	0.000	0.000	0.567	0.710	0.000	0.000
cis-1,3 dicloropropeno	0.148	0.349	0.159	0.285	0.000	1.000	0.037	0.681	0.043	0.763
Mevinphos	0.444	0.374	0.369	0.482	0.730	0.000	0.224	0.464	0.000	0.000
Benomyl	0.617	0.413	0.208	0.223	0.000	0.000	0.538	0.688	0.909	0.000
Methamidophos	0.227	0.419	0.315	0.700	0.730	0.000	0.290	0.360	0.001	0.000
Methiocarb	0.447	0.323	0.475	0.542	0.000	0.000	0.485	0.778	0.001	0.000
Dazomet	0.282	0.425	0.337	0.421	0.002	0.000	0.449	0.607	0.047	0.000
Chloropicrin	0.288	0.738	0.165	0.252	0.001	0.001	0.000	0.684	0.023	0.577
1,3-dicloropropeno	0.148	0.361	0.152	0.302	0.002	0.001	0.037	0.679	0.043	1.000
Terbufos	0.612	0.304	0.488	0.421	0.000	0.000	0.092	0.953	0.000	0.007
Etridiazol	0.505	0.553	0.387	0.466	0.000	0.000	0.221	0.828	0.000	0.000
Quintozene	0.630	0.693	0.502	0.248	0.000	0.000	0.549	0.971	0.000	0.012
Propoxur	0.405	0.285	0.451	0.521	0.511	0.000	0.398	0.620	0.004	0.000
Phosmet	0.687	0.534	0.634	0.681	0.000	0.000	0.359	0.762	0.008	0.000

2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético)	0.436	0.502	0.239	0.583	0.000	0.000	0.530	0.765	0.032	0.000
Acifluorfen	0.803	0.598	0.649	0.694	0.000	0.000	0.583	0.865	0.125	0.000
Alacloro	0.563	0.310	0.146	0.669	0.000	0.000	0.277	0.845	0.085	0.000
Asulam	0.460	0.502	0.587	0.223	0.002	0.000	0.549	0.480	0.182	0.000
Atrazina	0.422	0.425	0.427	0.621	0.000	0.000	0.617	0.743	0.061	0.000
Bromoxinil	0.582	1.000	0.404	0.480	0.000	0.000	0.668	0.830	0.017	0.000
Dalapón	0.232	0.483	0.281	0.471	0.005	0.000	0.607	0.638	0.849	0.000
Dicamba	0.436	0.598	0.499	0.563	0.000	0.000	0.454	0.698	0.094	0.000
Diclofop-metil	0.750	0.432	0.674	0.561	0.000	0.000	0.266	0.969	0.047	0.000
Difenamida	0.484	0.361	0.586	0.613	0.000	0.000	0.522	0.771	0.062	0.000
Diflufenican	0.888	0.515	0.577	0.631	0.000	0.000	0.591	1.000	0.182	0.000
Diuron	0.467	0.540	0.272	0.643	0.000	0.000	0.580	0.751	0.092	0.000
EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato)	0.353	0.202	0.352	0.484	0.000	0.000	0.232	0.810	0.083	0.000
Glifosato	0.300	0.706	0.717	0.753	0.009	0.000	0.773	0.000	0.509	0.000
Glufosinato	0.332	0.489	0.800	0.826	1.000	0.000	0.734	0.004	0.182	0.000
Imazetapir	0.614	0.413	0.270	0.727	0.000	0.000	0.628	0.742	0.455	0.000
Lenacil	0.470	0.438	0.577	0.679	0.000	0.000	1.000	0.797	1.000	0.000
Metribuzina	0.418	0.413	0.196	0.544	0.001	0.000	0.496	0.640	0.100	0.000
Metsulfuron Metil	0.854	0.534	1.000	1.000	0.000	0.000	0.586	0.697	0.455	0.000
Norflurazon	0.652	0.515	0.528	0.589	0.000	0.000	0.628	0.708	0.727	0.000
Paraquat	0.345	0.591	0.475	0.223	0.000	0.000	0.960	0.727	0.009	0.000
Pendimetalina	0.593	0.342	0.505	0.692	0.000	0.000	0.311	0.744	0.095	0.000
Propanil	0.428	0.393	0.566	0.622	0.000	0.000	0.409	0.794	0.033	0.000
Quinclorac	0.491	0.713	0.622	0.674	0.000	0.000	0.892	0.783	0.199	0.000

Sethoxydim	0.714	0.304	0.672	0.707	0.000	0.000	0.404	0.942	0.291	0.000
------------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------

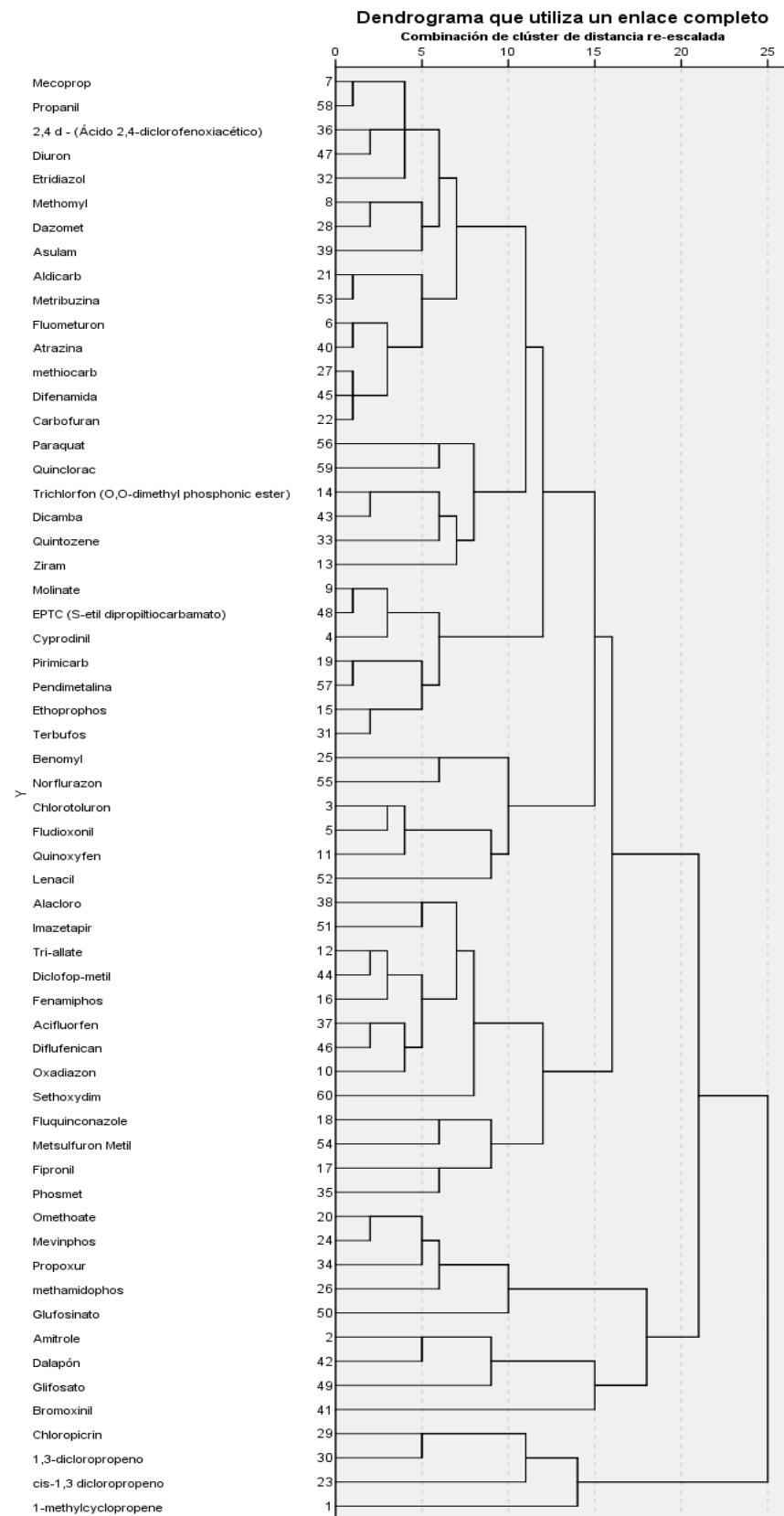
- Propiedades teóricas

NOMBRE	Energía total [KCal/Mol]	Energía térmica [KCal/Mol]	Capacidad calorífica [KCal/Mol-Kelvin]	Entropía [KCal/Mol-Kelvin]	Momento dipolar (Debye)
1-methylcyclopropene	1.000	0.139	0.000	0.000	0.099
Amitrole	0.974	0.122	0.026	0.028	0.408
Chlorotoluron	0.837	0.467	0.474	0.488	0.413
Cyprodinil	0.898	0.571	0.532	0.494	0.232
Fludioxonil	0.858	0.334	0.474	0.468	0.443
Fluometuron	0.867	0.437	0.512	0.571	0.524
Mecoprop	0.830	0.409	0.446	0.448	0.379
Methomyl	0.870	0.321	0.336	0.416	0.576
Molinate	0.865	0.549	0.415	0.400	0.281
Oxadiazon	0.688	0.699	0.856	0.803	0.151
Quinoxifen	0.709	0.409	0.577	0.573	0.282
Tri-allate	0.602	0.552	0.674	0.718	0.428
Ziram	0.339	0.395	0.498	0.606	0.000
Trichlorfon (O,O-dimethyl phosphonic ester)	0.624	0.274	0.451	0.510	0.127
Ethoprophos	0.731	0.594	0.599	0.657	0.199

Fenamiphos	0.745	0.761	0.840	0.852	0.379
Fipronil	0.533	0.355	0.887	0.955	1.000
Fluquinconazole	0.661	0.480	0.742	0.706	0.155
Pirimicarb	0.881	0.644	0.656	0.696	0.299
Omethoate	0.789	0.398	0.457	0.540	0.534
Aldicarb	0.856	0.455	0.471	0.510	0.369
Carbofuran	0.890	0.551	0.542	0.515	0.278
cis-1,3 dicloropropeno	0.837	0.093	0.030	0.089	0.232
Mevinphos	0.831	0.453	0.534	0.599	0.280
Benomyl	0.845	0.706	0.750	0.728	0.774
methamidophos	0.839	0.221	0.224	0.264	0.232
methiocarb	0.838	0.529	0.562	0.571	0.436
Dazomet	0.824	0.312	0.248	0.255	0.636
Chloropicrin	0.728	0.000	0.092	0.178	0.195
1,3-dicloropropeno	0.837	0.093	0.033	0.089	0.206
Terbufos	0.650	0.666	0.741	0.779	0.243
Etridiazol	0.629	0.201	0.346	0.407	0.663
Quintozene	0.522	0.090	0.361	0.429	0.271
Propoxur	0.897	0.536	0.522	0.519	0.282
Phosmet	0.673	0.493	0.683	0.716	0.791
2,4 d - (Ácido 2,4-diclorofenoxiacético)	0.759	0.256	0.347	0.388	0.438
Acifluorfen	0.708	0.428	0.754	0.796	0.409
Alacloro	0.804	0.709	0.699	0.697	0.575
Asulam	0.821	0.394	0.494	0.481	0.617
Atrazina	0.835	0.493	0.460	0.461	0.588
Bromoxinil	0.000	0.148	0.251	0.298	0.428

Dalapón	0.809	0.117	0.131	0.168	0.342
Dicamba	0.759	0.256	0.359	0.380	0.070
Diclofop-metil	0.688	0.595	0.773	0.792	0.589
Difenamida	0.890	0.638	0.597	0.588	0.394
Diflufenican	0.753	0.599	0.905	0.894	0.333
Diuron	0.759	0.381	0.446	0.485	0.649
EPTC (S-etil dipropiltiocarbamato)	0.865	0.597	0.494	0.521	0.239
Glifosato	0.864	0.264	0.314	0.349	0.261
Glufosinato	0.863	0.387	0.410	0.433	0.235
Imazetapir	0.848	0.728	0.790	0.742	0.565
Lenacil	0.887	0.656	0.540	0.452	0.440
Metribuzina	0.842	0.487	0.517	0.464	0.249
Metsulfuron Metil	0.720	0.680	0.949	0.952	0.487
Norflurazon	0.758	0.431	0.608	0.592	0.942
Paraquat	0.751	0.521	0.551	0.559	0.397
Pendimetalina	0.849	0.709	0.763	0.700	0.264
Propanil	0.769	0.337	0.362	0.365	0.436
Quinclorac	0.749	0.260	0.381	0.379	0.328
Sethoxydim	0.780	1.000	1.000	1.000	0.778

ANEXO C. Dendrograma con función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento Vecino más lejano



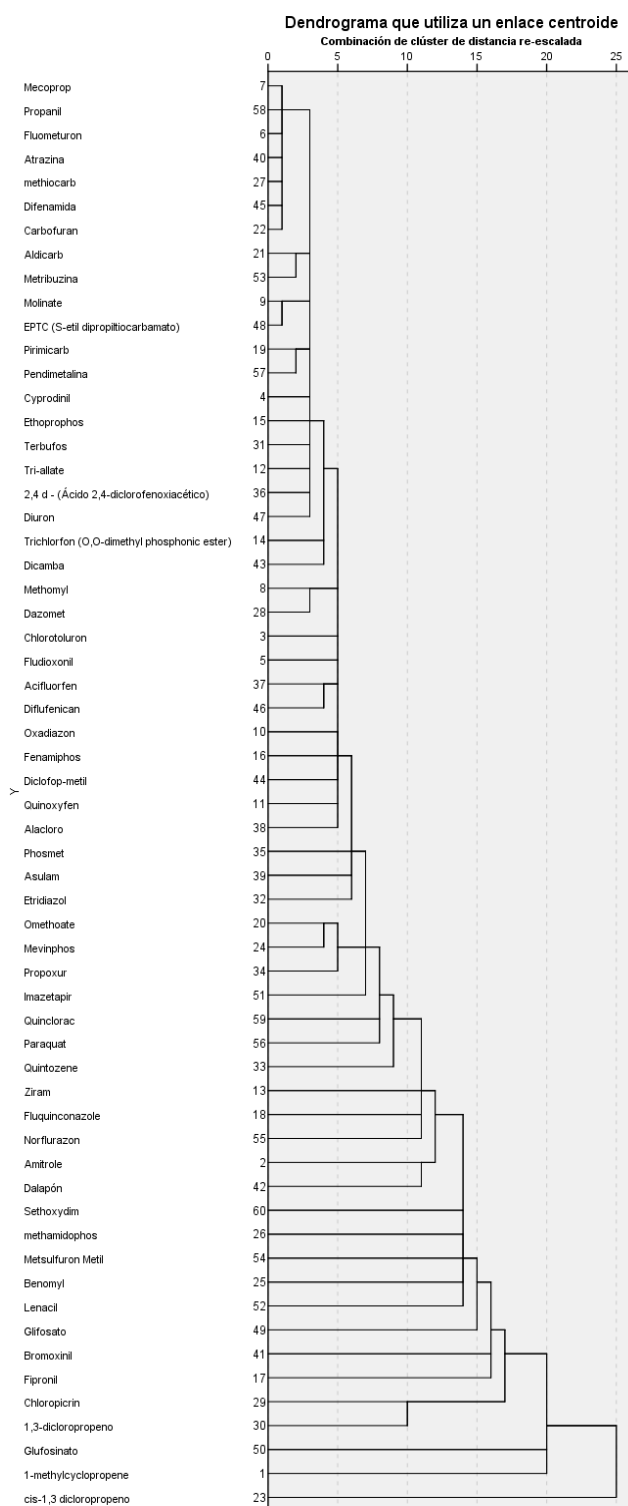
- Extracción de los agrupamientos

n	C	πc	Producto de πc	S ($C^* \sum \pi c$)
1	60	$1^*1 - 1^*1 - 1 - 1^*1 - 1 - 1^*1^* - 1^*1 - 1^*1^*1 - 1^*1 - 1^*1 - 1 - 1 - 1^*1 - 1 - 1^*1 - 1^*1 - 1^*1 - 1^*1 - 1 - 1 - 1^*1 - 1^*1 - 1^*1 - 1 - 1 - 1 - 1^*1 - 1 - 1 - 1^*1 - 1 - 1$	1	60
2	38	$2 - 2 - 1 - 2 - 1 - 2^* - 2 - 1^*1^*1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 2 - 2 - 1 - 1 - 2 - 2 - 1 - 2 - 1 - 1 - 2 - 2 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1$	1048576	39845888
3	28	$2 - 3 - 3 - 2^* - 2 - 3 - 2 - 3 - 1 - 3 - 2 - 2 - 2 - 3 - 1 - 2 - 3 - 3 - 1 - 2 - 2 - 3 - 1 - 1 - 3 - 1 - 3 - 1$	181398528	5079158784
4	21	$2 - 3 - 3 - 2^* - 2 - 3 - 2 - 4 - 3 - 4 - 2 - 4 - 2 - 3 - 3 - 1 - 4 - 4 - 1 - 4 - 4$	764411904	16052649984
5	18	$5 - 3 - 2^* - 5 - 2 - 4 - 3 - 4 - 2 - 4 - 2 - 3 - 3 - 1 - 4 - 5 - 4 - 4$	663552000	11943936000
6	15	$5 - 3 - 2^* - 5 - 6 - 3 - 4 - 6 - 2 - 6 - 1 - 4 - 5 - 4 - 4$	248832000	3732480000
7	13	$5 - 3 - 7 - 6 - 7 - 6 - 2 - 6 - 1 - 4 - 5 - 4 - 4$	101606400	1320883200
8	11	$8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 8 - 1 - 4 - 5 - 4 - 4$	36126720	397393920
9	9	$8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 9 - 4 - 9 - 4$	18289152	164602368
10	9	$8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 9 - 4 - 9 - 4$	18289152	164602368
11	9	$8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 9 - 4 - 9 - 4$	18289152	164602368
12	9	$8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 9 - 4 - 9 - 4$	18289152	164602368
13	8	$8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4$	6604416	52835328
14	8	$8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4$	6604416	52835328
15	7	$15 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4$	1769040	12383280
16	7	$15 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4$	1769040	12383280

17	7	15 - 6 - 7 - 6- 13- 9 -4	1769040	12383280
18	7	15 - 6 - 7 - 6- 13- 9 -4	1769040	12383280
19	7	15 - 6 - 7 - 6- 13- 9 -4	1769040	12383280
20	7	15 - 6 - 7 - 6- 13- 9 -4	1769040	12383280
21	6	21 - 7 - 6- 13- 9 -4	412776	2476656
22	6	21 - 7 - 6- 13- 9 -4	412776	2476656
23	6	21 - 7 - 6- 13- 9 -4	412776	2476656
24	6	21 - 7 - 6- 13- 9 -4	412776	2476656
25	6	21 - 7 - 6- 13- 9 -4	412776	2476656
26	6	21 - 7 - 6- 13- 9 -4	412776	2476656
27	6	21 - 7 - 6- 13- 9 -4	412776	2476656
28	5	28 - 6- 13- 9 -4	78624	393120
29	5	28 - 6- 13- 9 -4	78624	393120
30	5	28 - 6- 13- 9 -4	78624	393120
31	5	28 - 6- 13- 9 -4	78624	393120
32	5	28 - 6- 13- 9 -4	78624	393120
33	5	28 - 6- 13- 9 -4	78624	393120
34	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
35	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
36	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
37	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
38	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
39	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
40	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
41	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
42	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
43	4	34- 13- 9 -4	15912	63648

44	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
45	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
46	4	34- 13- 9 -4	15912	63648
47	3	47 - 9 -4	1692	5076
48	3	47 - 9 -4	1692	5076
49	3	47 - 9 -4	1692	5076
50	3	47 - 9 -4	1692	5076
51	3	47 - 9 -4	1692	5076
52	3	47 - 9 -4	1692	5076
53	3	47 - 9 -4	1692	5076
54	3	47 - 9 -4	1692	5076
55	3	47 - 9 -4	1692	5076
56	2	56 -4	224	448
57	2	56 -4	224	448
58	2	56 -4	224	448
59	2	56 -4	224	448
60	1	60	60	60
			Máx.	16052649984

ANEXO D. Dendrograma con función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento centroide



- Extracción de los agrupamientos

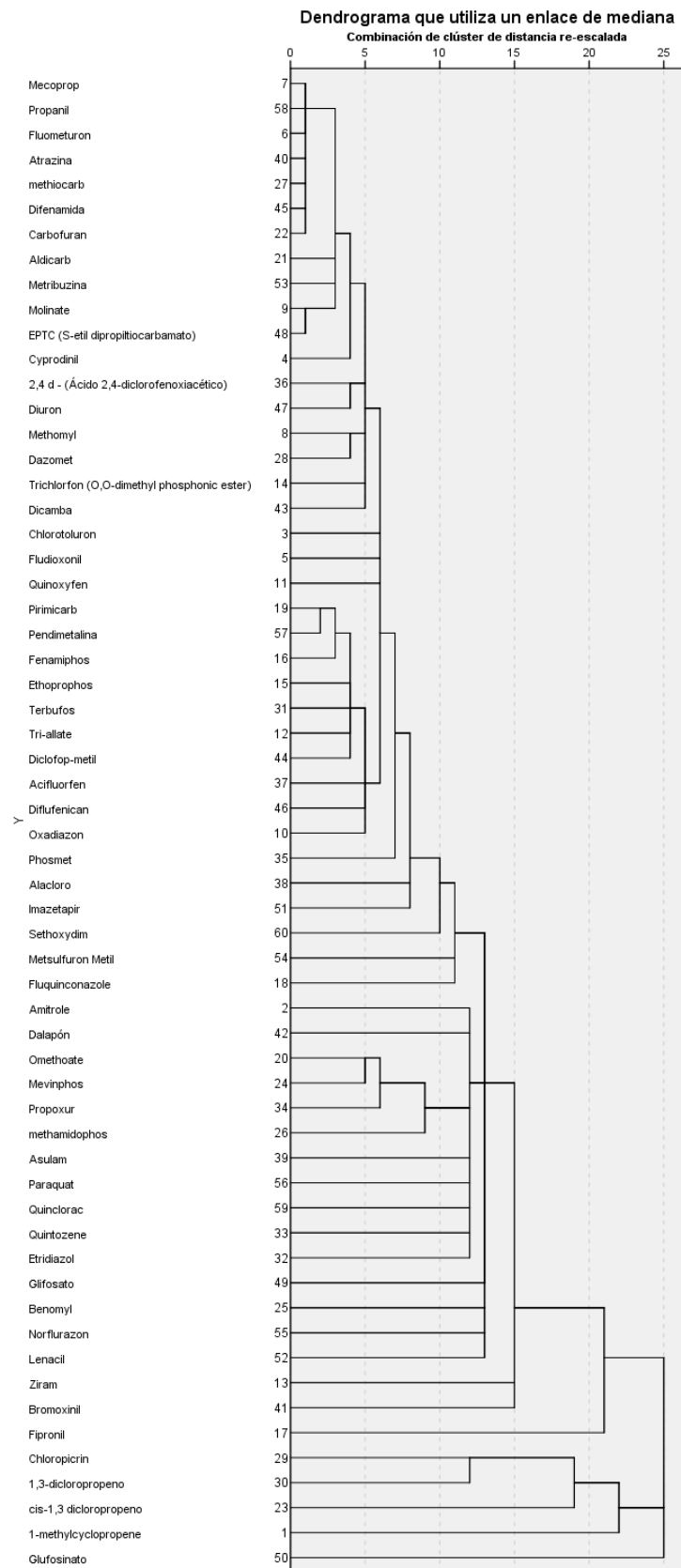
n	C	Πc	Producto de πc	S (C*Σπc)
1	35	1*1*1*1*1*1 - 1*1 - 1*1 - 1*1 - 1*1*1*1*1*1 - 1-1 - 1*1 - 1 - 1- 1*1 - 1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 1*1 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1*1 - 1- 1- 1- 1	1	35
2	35	1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 2 - 2 - 1*1*1*1*1*1 - 1-1 - 2 - 1 - 1- 2 - 1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 2 - 1- 1- 1 - 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	256	8960
3	34	1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 2 - 2 - 1*1*1*1*1*1 - 1-1 - 2 - 1 - 1- 2 - 1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	384	13056
4	34	1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 2 - 2 - 1*1*1*1*1*1 - 1-1 - 2 - 1 - 1- 2 - 1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	384	13056
5	34	1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 2 - 2 - 1*1*1*1*1*1 - 1-1 - 2 - 1 - 1- 2 - 1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	384	13056
6	34	1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 2 - 2 - 1*1*1*1*1*1 - 1-1 - 2 - 1 - 1- 2 - 1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	384	13056
7	34	7 - 2 - 2 - 2 - 1*1*1*1*1*1 - 1-1 - 2 - 1 - 1- 2 - 1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1	384	13056
8	34	7 - 2 - 2 - 2 - 1*1*1*1*1*1 - 1-1 - 2 - 1 - 1- 2 - 1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1	384	13056

30	28	21 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1*1*1*1 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	1008	28224
31	28	21 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1*1*1*1 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	1008	28224
32	23	32 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	384	8832
33	23	32 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	384	8832
34	23	32 - 1*1*1 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	384	8832
35	22	35 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	420	9240
36	22	35 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	420	9240
37	22	35 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	420	9240
38	22	35 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	420	9240
39	20	39 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	156	3120
40	20	39 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	156	3120
41	20	39 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	156	3120
42	17	42 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	168	2856
43	17	42 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	168	2856
44	17	42 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	168	2856
45	14	45 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	180	2520
46	14	45 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	180	2520
47	13	47 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	94	1222
48	13	47 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	94	1222
49	13	47 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	94	1222
50	13	47 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	94	1222

51	13	47 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	94	1222
52	8	52 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	104	832
53	7	53 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	106	742
54	7	53 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	106	742
55	5	55 - 2 - 1 - 1 - 1	110	550
56	5	55 - 2 - 1 - 1 - 1	110	550
57	4	57 - 1 - 1 - 1	57	228
58	4	57 - 1 - 1 - 1	57	228
59	2	59 - 1	59	118
60	1	60	60	60
			MÁX	28224

$B_{21} = \left\{ \begin{array}{l} \text{\{Mecoprop, Propanil, fluometuron, atrazina, methiocarb, difenamida, carbofuran, aldicarb,} \\ \text{metribuzina, molinate, EPTC, pirimicarb, pendimetalina, cyprodinil, ethoprophos, terbufos,} \\ \text{trallate, 2,4D, diuron, trichlorfon, dicamba\}, \{methomyl, dazomet\}, \{chlorotoluron\},} \\ \text{\{fludioxonil\}, \{acifluorfen, diflufenican\}, \{oxadiazon, fenamiphos, diclofop – metil,} \\ \text{quinoxifen, alacloro\}, \{phosmet\}, \{asulam\}, \{etridiazol\}, \{omethoate, mevinphos,} \\ \text{propoxur\}, \{imazetapir\}, \{quinclorac\}, \{paraquat\}, \{quintozene\}, \{ziram\}, \{norflurazon\},} \\ \text{\{fluquinconazole\}, \{amitrole, dalapon\}, \{sethoxydim\}, \{methamidophos\}, \{benomyl\},} \\ \text{\{metsulfuron – metil\}, \{lenacil\}, \{glifosato\}, \{bromoxinil\}, \{fipronil\},} \\ \text{\{chloropicrin, 1,3D\}, \{glufosinato\}, \{1 – MCP\}, \{Cis – 1,3D\}} \end{array} \right\}$

ANEXO E. Dendrograma con función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento mediana



- Extracción de los agrupamientos

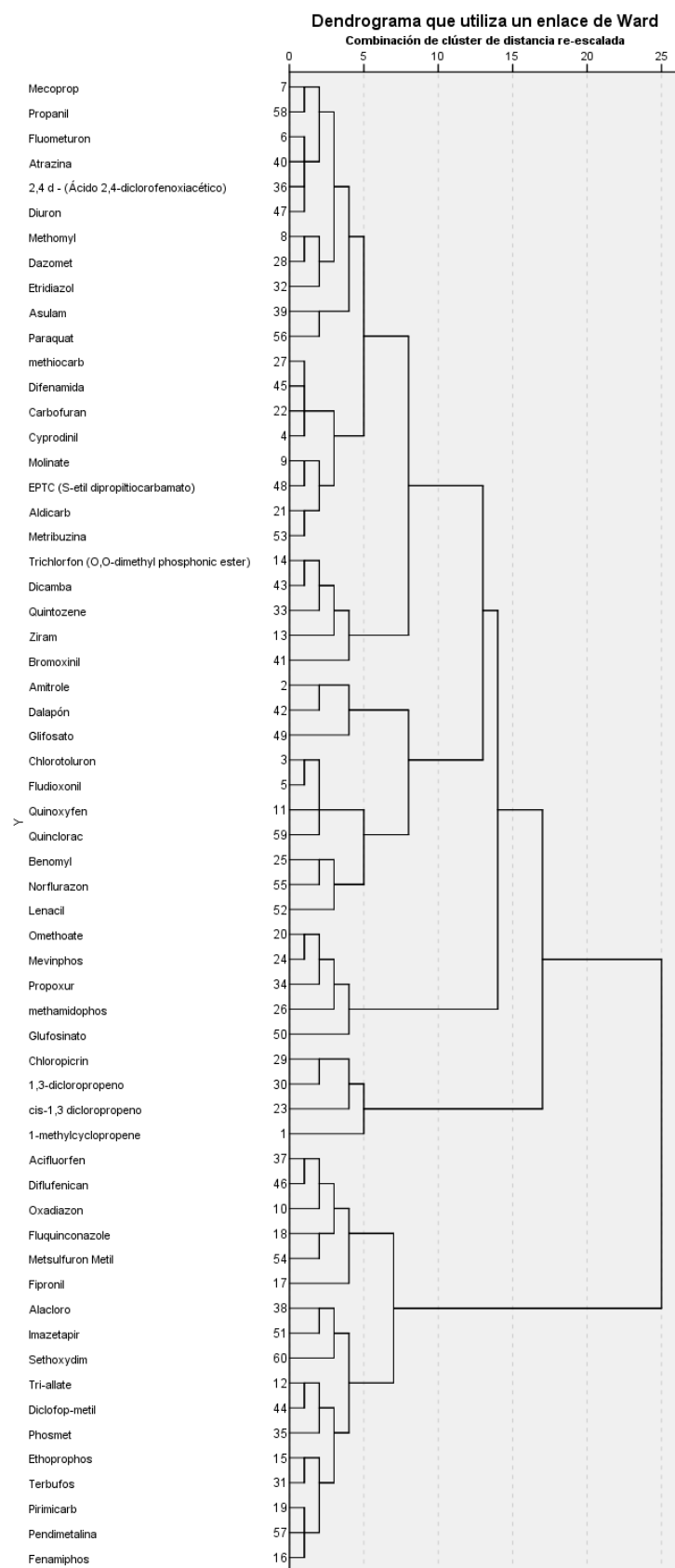
n	C	Πс	Producto de πс	S (C*Σπс)
1	48	1*1*1*1*1*1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1-1 - 1-1 - 1*1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1 - 1	1	48
2	48	1*1*1*1*1*1*1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1-2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1	64	3072
3	45	1*1*1*1*1*1*1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1-3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 3 - 1 - 1	216	9720
4	43	1*1*1*1*1*1*1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1-3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	384	16512
5	43	1*1*1*1*1*1*1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1-3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	384	16512
6	43	1*1*1*1*1*1*1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1-3 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	384	16512
7	39	7 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1-7 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	6272	244608
8	39	7 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1-7 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	6272	244608
9	39	7 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1-7 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	6272	244608
10	36	7 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1-10 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - - 1 - 1 - 4 - 1	8960	322560
11	27	11 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1 - 1-10 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	19360	522720
12	26	12 - 2 - 2 - 1 - 1-1 - 1 - 1 - 1-10 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	21120	549120

32	17	32 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1408	23936
33	17	32 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1408	23936
34	15	34 - 1 - 1 - 1 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1496	22440
35	14	35 - 1 - 1 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1540	21560
36	14	35 - 1 - 1 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1540	21560
37	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
38	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
39	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
40	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
41	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
42	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
43	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
44	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
45	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
46	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
47	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
48	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
49	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
50	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
51	12	37 - 1 - 11 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	1628	19536
52	6	52 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	208	1248
53	6	52 - 1 - 1 - 1 - 4 - 1	208	1248
54	4	54 - 1 - 4 - 1	216	864
55	3	55 - 4 - 1	220	660
56	3	55 - 4 - 1	220	660
57	3	55 - 4 - 1	220	660

58	3	55 - 4 - 1	220	660
59	3	55 - 4 - 1	220	660
60	1	60	60	60
			MÁX	549120

$$B_{12} = \left\{ \begin{array}{l} \{\text{Mecoprop, propanil, fluometuron, atrazina, methiocarb, difenamida, carbofuran, aldicarb, metribuzina,} \\ \text{molinate, EPTC, cyprodinil}\}, \{2,4\text{D, diuron}\}, \{\text{methomyl, dazomet}\}, \{\text{trichlorfon}\}, \{\text{dicamba}\}, \{\text{chlorotoluron}\}, \\ \{\text{fludioxonil}\}, \{\text{quinoxifen}\}, \{\text{pirimicarb, pendimetalina, fenamiphos, ethoprophos, terbufos, triallate,} \\ \text{diclofop-metil, acifluorfen, diflufenican, oxadiazon}\}, \{\text{phosmet}\}, \{\text{alacloro}\}, \{\text{imazetapir}\}, \{\text{sethoxydim}\}, \\ \{\text{metsulfuron-metil}\}, \{\text{fluquinconazole}\}, \{\text{amitrole}\},, \\ \{\text{dalapon, omethoate, mevinphos, propoxur, asulam} \\ \text{methamidophos, paraquat, quinclorac, etridiazol, glifosato}\}, \\ \{\text{benomyl}\}, \{\text{norflurazon}\}, \{\text{lenacil}\}, \{\text{ziram}\} \\ \{\text{bromoxinil}\}, \{\text{fipronil}\}, \{\text{chloropicrin, 1,3D, cis-1,3D, 1-MCP}\}, \{\text{glufosinato}\} \end{array} \right\}$$

ANEXO F. Dendrograma con función de similitud Euclidiana y metodología de agrupamiento Ward



- Extracción de agrupamientos

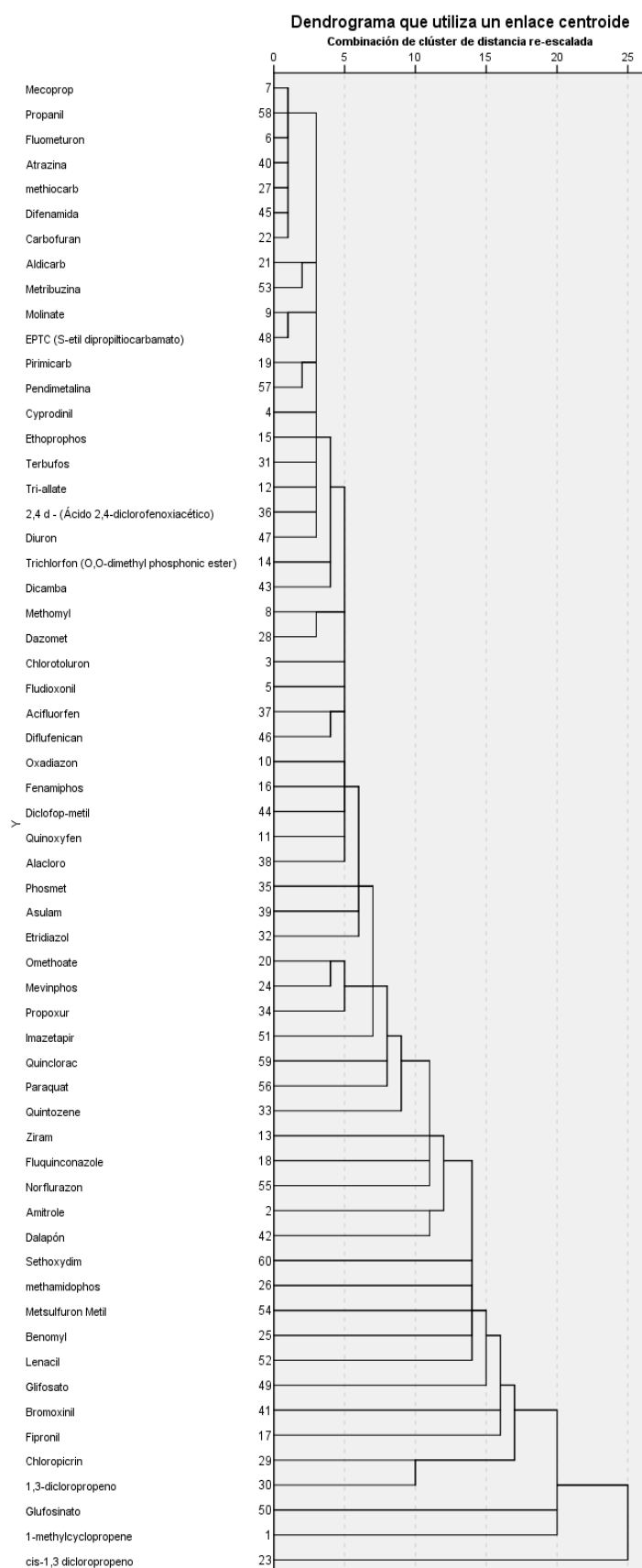
n	C	πс	Producto de πс	S ($C \cdot \sum \pi с$)
1	36	1*1 - 1*1*1*1* - 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1*1*1 - 1*1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1*1	1	36
2	36	2 - 1*1*1*1* - 2 - 1 - 2 - 1*1*1*1 - 2 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1*1*1	65536	2359296
3	27	2 - 1*1*1*1* - 3 - 2 - 1*1*1*1 - 2 - 2 - 3 - 1 - 1 - 3 - 2 - 1 - 1 - 3 - 3 - 1 - 1 - 3 - 1 - 3 - 2 - 1 - 3 - 3 - 2 - 3	7558272	204073344
4	23	2 - 4 - 3 - 2 - 4 - 4 - 3 - 1 - 1 - 3 - 4 - 3 - 3 - 1 - 1 - 4 - 3 - 2 - 1 - 3 - 3 - 2 - 3	3.22E+08	7417184256
5	17	2 - 4 - 3 - 2 - 4 - 4 - 5 - 3 - 4 - 3 - 5 - 4 - 5 - 1 - 3 - 3 - 5	6.22E+08	10575360000
6	15	6 - 3 - 2 - 4 - 4 - 5 - 3 - 4 - 3 - 5 - 4 - 6 - 3 - 3 - 5	5.6E+08	8398080000
7	14	6 - 3 - 2 - 4 - 4 - 5 - 3 - 7 - 5 - 4 - 6 - 3 - 3 - 5	3.27E+08	4572288000
8	12	6 - 3 - 2 - 8 - 5 - 3 - 7 - 5 - 4 - 6 - 3 - 8	87091200	1045094400
9	11	9 - 2 - 8 - 5 - 3 - 7 - 5 - 4 - 6 - 3 - 8	43545600	479001600
10	10	9 - 2 - 8 - 5 - 10 - 5 - 4 - 6 - 3 - 8	20736000	207360000
11	8	11 - 8 - 5 - 10 - 5 - 4 - 6 - 11	5808000	46464000
12	8	11 - 8 - 5 - 10 - 5 - 4 - 6 - 11	5808000	46464000
13	8	11 - 8 - 5 - 10 - 5 - 4 - 6 - 11	5808000	46464000
14	8	11 - 8 - 5 - 10 - 5 - 4 - 6 - 11	5808000	46464000
15	8	11 - 8 - 5 - 10 - 5 - 4 - 6 - 11	5808000	46464000
16	8	11 - 8 - 5 - 10 - 5 - 4 - 6 - 11	5808000	46464000
17	7	11 - 8 - 5 - 10 - 5 - 4 - 17	1496000	10472000
18	7	11 - 8 - 5 - 10 - 5 - 4 - 17	1496000	10472000
19	6	19 - 5 - 10 - 5 - 4 - 17	323000	1938000
20	6	19 - 5 - 10 - 5 - 4 - 17	323000	1938000
21	6	19 - 5 - 10 - 5 - 4 - 17	323000	1938000
22	6	19 - 5 - 10 - 5 - 4 - 17	323000	1938000

23	6	19 - 5 - 10 - 5 -4 -17	323000	1938000
24	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
25	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
26	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
27	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
28	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
29	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
30	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
31	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
32	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
33	5	24 - 10 - 5 -4 -17	81600	408000
34	4	34 - 5 -4 -17	11560	46240
35	4	34 - 5 -4 -17	11560	46240
36	4	34 - 5 -4 -17	11560	46240
37	4	34 - 5 -4 -17	11560	46240
38	4	34 - 5 -4 -17	11560	46240
39	3	39 -4 -17	2652	7956
40	3	39 -4 -17	2652	7956
41	3	39 -4 -17	2652	7956
42	3	39 -4 -17	2652	7956
43	2	43 -17	731	1462
44	2	43 -17	731	1462
45	2	43 -17	731	1462
46	2	43 -17	731	1462
47	2	43 -17	731	1462
48	2	43 -17	731	1462
49	2	43 -17	731	1462

50	2	43 -17	731	1462
51	2	43 -17	731	1462
52	2	43 -17	731	1462
53	2	43 -17	731	1462
54	2	43 -17	731	1462
55	2	43 -17	731	1462
56	2	43 -17	731	1462
57	2	43 -17	731	1462
58	2	43 -17	731	1462
59	2	43 -17	731	1462
60	1	60	60	60
			MÁX	10575360000

$B_5 = \left\{ \begin{array}{l} \{\text{Mecoprop, propanil}\}, \{\text{fluometuron, atrazina, 2,4D, diuron}\}, \{\text{methomyl, dazomet, etridiazol}\}, \\ \{\text{asulam, paraquat}\}, \{\text{methiocarb, difenamida, carbofuran, cyprodinil}\}, \{\text{molinate, EPTC, aldicarb,} \\ \text{metribuzina}\}, \{\text{trichlorfon, dicamba, quintozone, ziram, bromoxinil}\}, \{\text{amitrole, dalapon, glifosato}\}, \\ \text{chlorotoluron, fludioxonil, quinoxifen, quinclorac}\}, \{\text{benomyl, norflurazon, lenacil}\}, \\ \{\text{omethoate, mevinphos, propoxur, methamidophos, glufosinato}\}, \{\text{chloropicrin, 1,3D- Cis 1,3D,} \\ \text{1-MCP}\}, \{\text{acifluorfen, diflufenican, oxadiazon, fluquinconazole, metsulfuron-metil}\}, \\ \{\text{fipronil}\}, \{\text{alaclo, imazetapir, sethoxydim}\}, \{\text{triallate, diclofop-metil,} \\ \text{phosmet}\}, \{\text{ethoprophos, terbufos, pirimicarb, pendimetalina,} \\ \text{fenamiphos}\} \end{array} \right\}$

ANEXO G. Dendrograma con función de similitud Minkowski y metodología de agrupamiento centroeide



- Extracción de agrupamientos

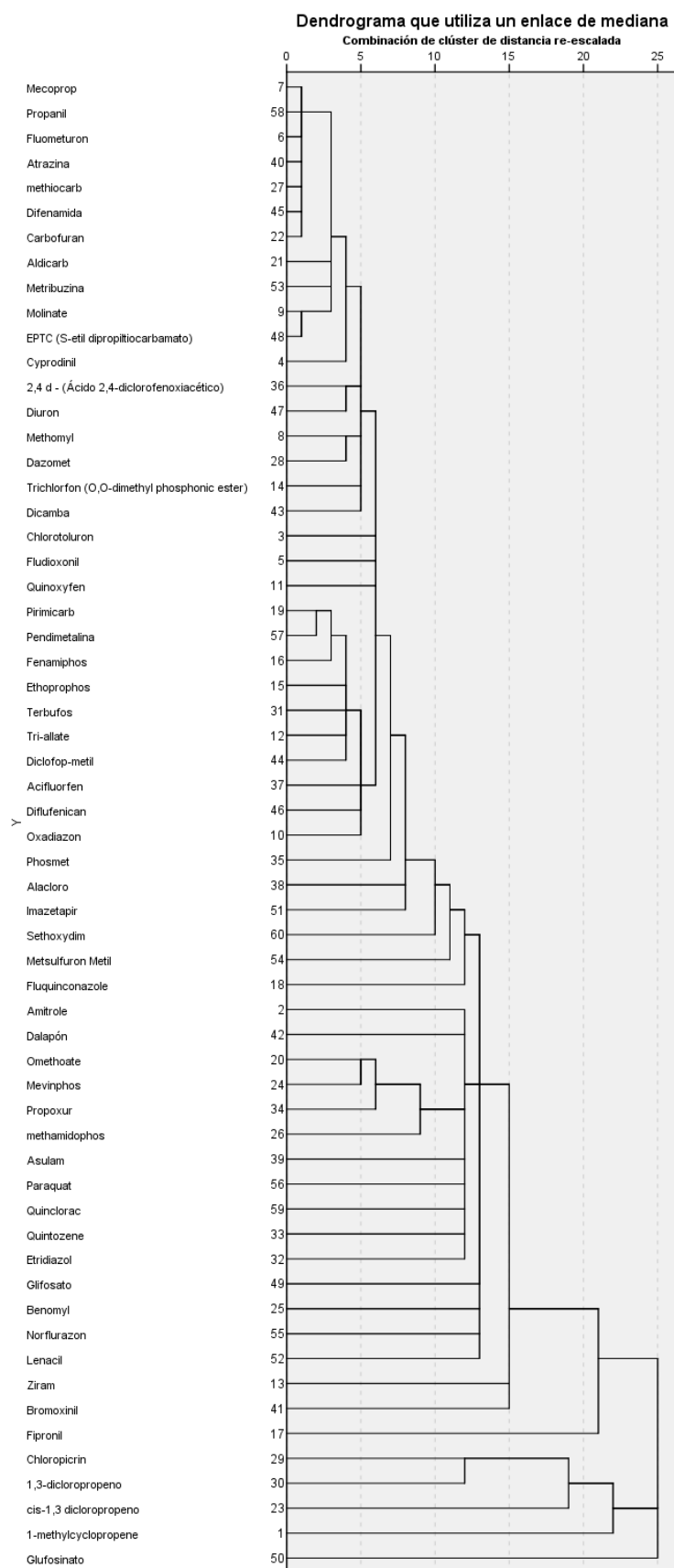
n	C	πс	Producto de πс	S (C*Σπс)
1	46	1*1*1*1*1*1 - 1*1 - 1*1 - 1*1 - 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1*1* - 1- 1- 1*1 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1*1 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1*1 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1*1 - 1- 1- 1	1	46
2	46	1*1*1*1*1*1 - 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	256	11776
3	45	1*1*1*1*1*1 - 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	384	17280
4	45	1*1*1*1*1*1 - 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	384	17280
5	45	1*1*1*1*1*1 - 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	384	17280
6	45	1*1*1*1*1*1 - 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	384	17280
7	45	7- 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	2688	120960
8	45	7- 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	2688	120960
9	45	7- 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	2688	120960
10	45	7- 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	2688	120960
11	45	7- 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	2688	120960
12	45	7- 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	2688	120960
13	45	7- 2- 2- 2- 2- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 1-1- 2* - 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2- 1- 1- 1	2688	120960

[illegible]

37	22	35- 3 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	420	9240
38	22	35- 3 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	420	9240
39	20	39- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	156	3120
40	20	39- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	156	3120
41	18	41- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	164	2952
42	17	42- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	168	2856
43	17	42- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	168	2856
44	17	42- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	168	2856
45	14	45- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	180	2520
46	14	45- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	180	2520
47	13	47 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	94	1222
48	13	47 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	94	1222
49	13	47 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	94	1222
50	13	47 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	94	1222
51	13	47 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	94	1222
52	8	52- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	104	832
53	7	53- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	106	742
54	7	53- 1- 1- 2 - 1- 1- 1	106	742
55	5	55- 2 - 1- 1- 1	110	550
56	5	55- 2 - 1- 1- 1	110	550
57	4	57 - 1- 1- 1	57	228
58	4	57 - 1- 1- 1	57	228
59	2	59- 1	59	118
60	1	60	60	60
			MÁX	120960

$B_7 = \left\{ \begin{array}{l} \{\text{Mecoprop, Propanil, fluometuron, atrazina, methiocarb, difenamida, carbofuran}\}, \{\text{aldicarb,} \\ \text{metribuzina}\}, \{\text{molinate, EPTC}\}, \{\text{pirimicarb, pendimetalina}\}, \{\text{cyprodinil}\}, \{\text{ethoprophos}\}, \{\text{terbufos}\}, \\ \{\text{triallate}\}, \{2,4\text{D}\}, \{\text{diuron}\}, \{\text{trichlorfon}\}, \{\text{dicamba}\}, \{\text{methomyl, dazomet}\}, \{\text{chlorotoluron}\}, \\ \{\text{fludioxonil}\}, \{\text{acifluorfen, diflufenican}\}, \{\text{oxadiazon}\}, \{\text{fenamiphos}\}, \{\text{diclofop – metil}\}, \\ \{\text{quinoxifen}\}, \{\text{alacoloro}\}, \{\text{phosmet}\}, \{\text{asulam}\}, \{\text{etridiazol}\}, \{\text{omethoate, mevinphos,} \\ \text{propoxur}\}, \{\text{imazetapir}\}, \{\text{quinclorac}\}, \{\text{paraquat}\}, \{\text{quintozene}\}, \{\text{ziram}\}, \{\text{norflurazon}\}, \\ \{\text{fluquinconazole}\}, \{\text{amitrole, dalapon}\}, \{\text{sethoxydim}\}, \{\text{methamidophos}\}, \{\text{benomyl}\}, \\ \{\text{metsulfuron – metil}\}, \{\text{lenacil}\}, \{\text{glifosato}\}, \{\text{bromoxinil}\}, \{\text{fipronil}\}, \\ \{\text{chloropicrin, 1,3D}\}, \{\text{glufosinato}\}, \{1 - \text{MCP}\}, \{\text{Cis} - 1,3\text{D}\} \end{array} \right\}$

ANEXO H. Dendrograma con función de similitud Minkowski y metodología de agrupamiento mediana



- Extracción de agrupamiento

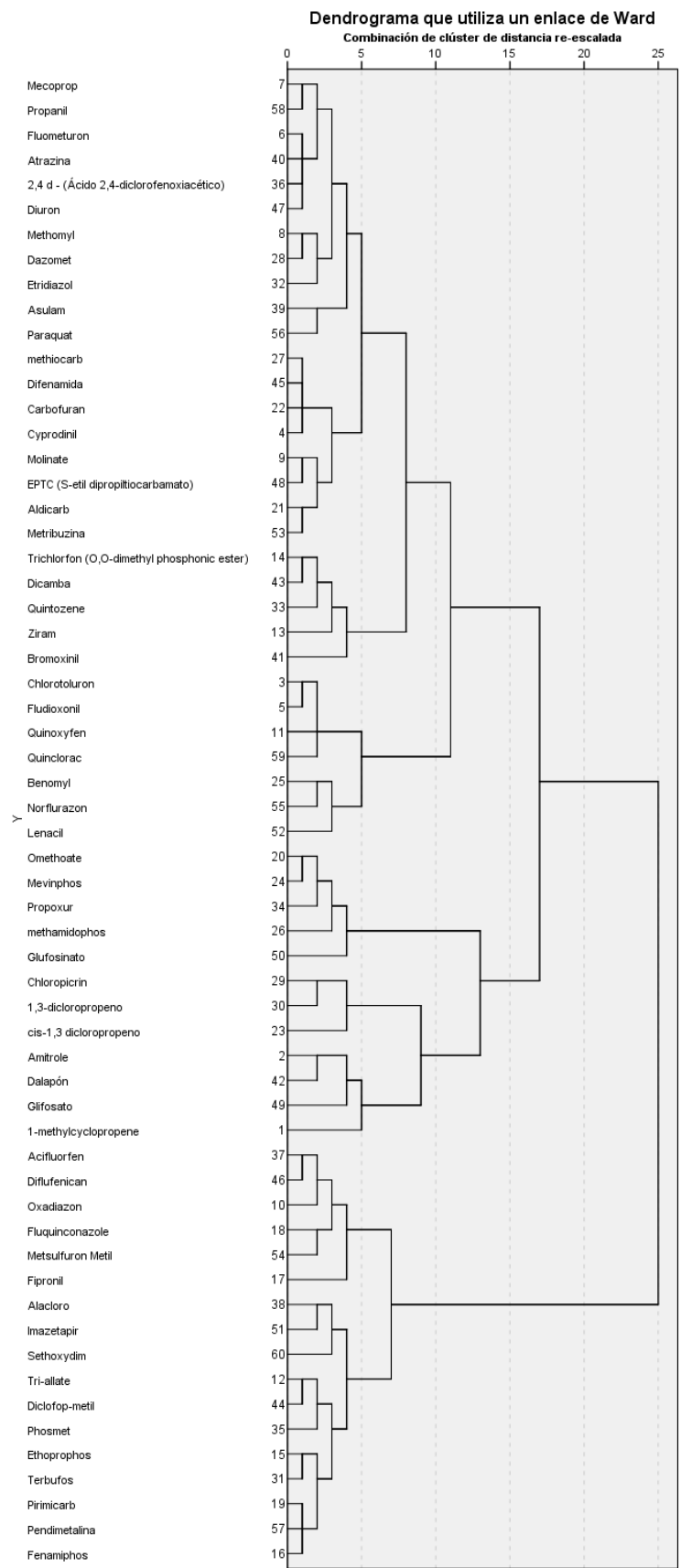
n	C	πс	Producto de πс	S ($C*\sum \pi c$)
1	48	$1^*1^*1^*1^*1^*1 - 1- 1- 1^*1 - 1 - 1^*1 - 1^*1 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 1^*1 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1-$ $1^*1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1^*1 - 1- 1- 1$	1	48
2	48	$1^*1^*1^*1^*1^*1 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1-$ $1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1$	64	3072
3	45	$1^*1^*1^*1^*1^*1 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1-$ $1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1$	216	9720
4	43	$1^*1^*1^*1^*1^*1 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1- 1- 1-$ $1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	384	16512
5	43	$1^*1^*1^*1^*1^*1 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1- 1- 1-$ $1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	384	16512
6	43	$1^*1^*1^*1^*1^*1 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1- 1- 1-$ $1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	384	16512
7	39	$7 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 7- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1-$ $4- 1$	6272	244608
8	39	$7 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 7- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1-$ $4- 1$	6272	244608
9	39	$7 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 7- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1-$ $4- 1$	6272	244608
10	36	$7 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	6272	225792
11	26	$11- 1- 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 1- 10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	19360	503360
12	25	$12 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	21120	528000
13	25	$12 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	21120	528000
14	25	$12 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	21120	528000
15	25	$12 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	21120	528000
16	25	$12 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	21120	528000
17	25	$12 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1- 1- 10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1$	21120	528000

18	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
19	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
20	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
21	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
22	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
23	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
24	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
25	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
26	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
27	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
28	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
29	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
30	21	18 - 1- 1- 1-10- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	7920	166320
31	17	31- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1364	23188
32	16	32- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1408	22528
33	16	32- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1408	22528
34	14	34- 1- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1496	20944
35	13	35- 1- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1540	20020
36	12	36- 1- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1584	19008
37	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
38	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
39	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
40	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
41	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
42	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
43	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
44	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908

45	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
46	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
47	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
48	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
49	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
50	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
51	11	37- 11- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1	1628	17908
52	6	52- 1- 1- 1- 4- 1	208	1248
53	6	52- 1- 1-1- 4- 1	208	1248
54	4	54- 1- 4- 1	216	864
55	3	55- 4- 1	220	660
56	3	55- 4- 1	220	660
57	3	55- 4- 1	220	660
58	3	55- 4- 1	220	660
59	3	55- 4- 1	220	660
60	1	60	60	60
			MÁX	528000

$B_{12} = \left\{ \begin{array}{l} \text{\{Mecoprop, Propanil, fluometuron, atrazina, methiocarb, difenamida, carbofuran, aldicarb,} \\ \text{\ metribuzina, molinate, EPTC, cyprodinil\}, \{2,4D, diuron\}, \{\text{methomyl, dazomet}\},} \\ \text{\{trichlorfon\}, \{dicamba\}, \{\text{chlorotoluron}\}, \{\text{fludioxonil}\}, \{\text{quinoxifen}\}, \{\text{pirimicarb},} \\ \text{\ pendimetalina, fenamiphos, ethoprophos, terbufos, triallate, diclofop – metil, acifluorfen,} \\ \text{\ diflufenican, oxadiazon\}, \{\text{phosmet}\}, \{\text{alacoloro}\}, \{\text{imazetapir}\}, \{\text{sethoxydim}\},} \\ \text{\{metsulfuron – metil\}, \{\text{fluquinconazole}\}, \{\text{amitrole, dalapon, omethoate, mevinphos},} \\ \text{\ propoxur, methamidophos, asulam, paraquat, quinclorac, quintozone, etridiazol\},} \\ \text{\{glifosato\}, \{\text{benomyl}\}, \{\text{norflurazon}\}, \{\text{lenacil}\}, \{\text{ziram}\}, \{\text{bromoxinil}\}, \{\text{fipronil}\},} \\ \text{\{chloropicrin, 1,3D, Cis 1,3D, 1 – MCP\}, \{\text{glufosinato}\}} \end{array} \right\}$

ANEXO I. Dendrograma con función de similitud Minkowski y metodología de agrupamiento ward



- Extracción de los agrupamientos

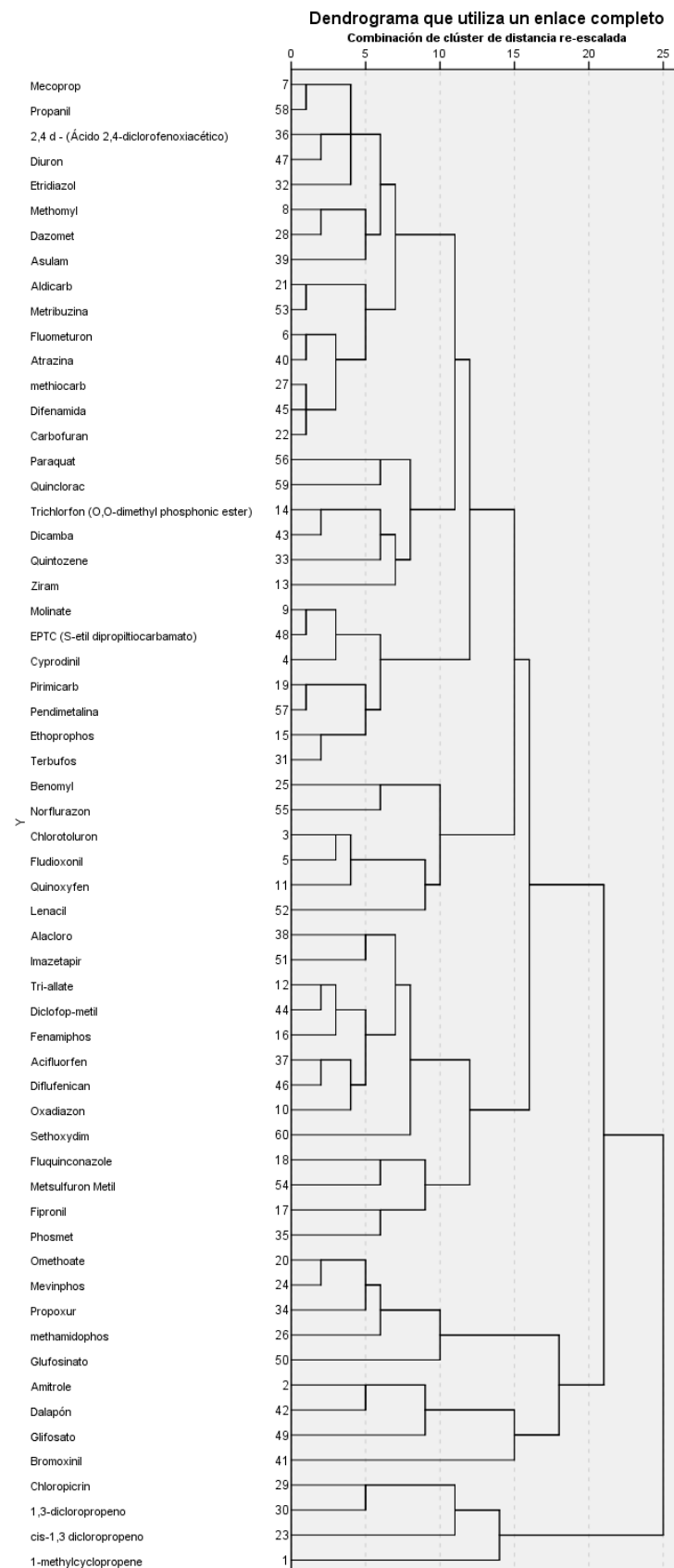
n	C	πc	Producto de πc	S ($C \cdot \sum \pi c$)
1	36	1*1 - 1*1*1*1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1*1*1 - 1*1 - 1*1 - 1*1 - 1- 1- 1- 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1- 1- 1- 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1*1	1	36
2	36	2 - 1*1*1*1 - 2 - 1 - 2 - 1*1*1*1 - 2 - 2 - 2 - 1- 1- 1- 2 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1- 1- 1- 2 - 1 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1 - 2 - 1*1*1	65536	2359296
3	27	2 - 1*1*1*1 - 3 - 2 - 1*1*1*1 - 2 - 2 - 3- 1- 1- 2 - 1 - 1 - 3 - 3- 1- 1- 3 - 3 - 1 - 3 - 2 - 1 - 3 - 3 - 2 - 3	7558272	204073344
4	21	2 - 4 - 3 - 2 - 4 - 4 - 4 - 1- 4 - 3 - 4 - 1- 3 - 4 - 3 - 2 - 1 - 3 - 3 - 2 - 3	573308928	12039487488
5	17	2 - 4 - 3 - 2 - 4 - 4 - 5 - 4 - 3 - 5 - 3 - 4 - 5 - 1 - 3 - 3 - 5	622080000	10575360000
6	15	6 - 3 - 2 - 4 - 4 - 5 - 4 - 3 - 5 - 3 - 4 - 6 - 3 - 3 - 5	559872000	8398080000
7	13	6 - 3 - 2 - 4 - 4 - 5 - 7 - 5 - 7 - 6 - 3 - 3 - 5	190512000	2476656000
8	11	6 - 3 - 2 - 8 - 5 - 7 - 5 - 7 - 6 - 3 - 8	50803200	558835200
9	10	9 - 2 - 8 - 5 - 7 - 5 - 7 - 6 - 3 - 8	25401600	254016000
10	10	9 - 2 - 8 - 5 - 7 - 5 - 7 - 6 - 3 - 8	25401600	254016000
11	8	11 - 8 - 5 - 7 - 5 - 7 - 6 - 11	7114800	56918400
12	7	11 - 8 - 5 - 7 - 12 - 6 - 11	2439360	17075520
13	7	11 - 8 - 5 - 7 - 12 - 6 - 11	2439360	17075520
14	7	11 - 8 - 5 - 7 - 12 - 6 - 11	2439360	17075520
15	7	11 - 8 - 5 - 7 - 12 - 6 - 11	2439360	17075520
16	7	11 - 8 - 5 - 7 - 12 - 6 - 11	2439360	17075520
17	6	11 - 8 - 5 - 7 - 12 - 17	628320	3769920
18	6	11 - 8 - 5 - 7 - 12 - 17	628320	3769920
19	5	19 - 5 - 7 - 12 - 17	135660	678300
20	5	19 - 5 - 7 - 12 - 17	135660	678300
21	5	19 - 5 - 7 - 12 - 17	135660	678300
22	5	19 - 5 - 7 - 12 - 17	135660	678300

23	5	19 - 5- 7 - 12 - 17	135660	678300
24	4	24- 7 - 12 - 17	34272	137088
25	4	24- 7 - 12 - 17	34272	137088
26	4	24- 7 - 12 - 17	34272	137088
27	4	24- 7 - 12 - 17	34272	137088
28	4	24- 7 - 12 - 17	34272	137088
29	4	24- 7 - 12 - 17	34272	137088
30	4	24- 7 - 12 - 17	34272	137088
31	3	31- - 12 - 17	6324	18972
32	3	31- - 12 - 17	6324	18972
33	3	31- - 12 - 17	6324	18972
34	3	31- - 12 - 17	6324	18972
35	3	31- - 12 - 17	6324	18972
36	3	31- - 12 - 17	6324	18972
37	3	31- - 12 - 17	6324	18972
38	3	31- - 12 - 17	6324	18972
39	3	31- - 12 - 17	6324	18972
40	3	31- - 12 - 17	6324	18972
41	3	31- - 12 - 17	6324	18972
42	3	31- - 12 - 17	6324	18972
43	2	43 - 17	731	1462
44	2	43 - 17	731	1462
45	2	43 - 17	731	1462
46	2	43 - 17	731	1462
47	2	43 - 17	731	1462
48	2	43 - 17	731	1462
49	2	43 - 17	731	1462

50	2	43 - 17	731	1462
51	2	43 - 17	731	1462
52	2	43 - 17	731	1462
53	2	43 - 17	731	1462
54	2	43 - 17	731	1462
55	2	43 - 17	731	1462
56	2	43 - 17	731	1462
57	2	43 - 17	731	1462
58	2	43 - 17	731	1462
59	2	43 - 17	731	1462
60	1	60	60	60
			MÁX	12039487488

$B_4 = \left\{ \begin{array}{l} \{\text{Mecoprop, Propanil}\}, \{\text{fluometuron, atrazina, 2,4D, diuron}\}, \{\text{methomyl, dazomet, etridiazol}\}, \\ \{\text{asulam, paraquat}\}, \{\text{methiocarb, difenamida, carbofuran, cyprodinil}\}, \{\text{molinate, EPTC,} \\ \text{aldicarb, metribuzina}\}, \{\text{trichlorfon, dicamba, quintozone, ziram}\}, \{\text{bromoxinil}\}, \\ \{\text{chlorotoluron, fludioxonil, quinoxifen, quinclorac}\}, \{\text{benomyl, norflurazon, lenacil}\}, \\ \{\text{omethoate, mevinphos, propoxur, methamidophos}\}, \{\text{glufosinato}\}, \{\text{chloropicrin,} \\ \text{1,3D, Cis 1,3D}\}, \{\text{amitrole, dalapon, glifosato, 1 - MCP}\}, \{\text{acifluorfen, diflufenican,} \\ \text{oxadiazon}\}, \{\text{fluquinconazole, metsulfuron - metil}\}. \{\text{fipronil}\}, \\ \{\text{alacoloro, imazetapir, sethoxydim}\}, \{\text{triallate, diclofop - metil, phosmet}\}, \{\text{ethoprophos,} \\ \text{terbufos}\}, \{\text{pirimicarb, pendimetalina, fenamiphos}\} \end{array} \right\}$

ANEXO J. Dendrograma con función de similitud Minkowski y metodología de agrupamiento vecino más lejano



- Extracción de los agrupamientos

n	C	πс	Producto de πс	S (C*Σπс)
1	38	1*1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1 - 1*1*1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1 - 1*1 - 1 - 1	1	38
2	38	2 - 2 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1*1*1 - 2 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 2 - 2 - 1 - 1 - 2 - 2 - 1 - 2 - 1 - 1 - 2 - 2 - 2 - 1 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1 - 2 - 1 - 1	1048576	39845888
3	29	2 - 2 - 1 - 3 - 2 - 2 - 3 - 2 - 3 - 1 - 3 - 2 - 2 - 2 - 3 - 1 - 2 - 3 - 3 - 1 - 2 - 2 - 3 - 1 - 1 - 3 - 1 - 3 - 1	120932352	3507038208
4	22	2 - 2 - 1 - 3 - 2 - 2 - 3 - 2 - 4 - 3 - 4 - 2 - 4 - 2 - 3 - 3 - 1 - 4 - 4 - 1 - 4 - 4	509607936	11211374592
5	18	5 - 3 - 2 - 5 - 2 - 4 - 3 - 4 - 2 - 4 - 2 - 3 - 3 - 1 - 4 - 5 - 4 - 4	663552000	11943936000
6	15	5 - 3 - 2 - 5 - 6 - 3 - 4 - 6 - 2 - 6 - 1 - 4 - 5 - 4 - 4	248832000	3732480000
7	13	5 - 3 - 7 - 6 - 7 - 6 - 2 - 6 - 1 - 4 - 5 - 4 - 4	101606400	1320883200
8	11	8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 8 - 1 - 4 - 5 - 4 - 4	36126720	397393920
9	9	8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 9 - 4 - 9 - 4	18289152	164602368
10	9	8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 9 - 4 - 9 - 4	18289152	164602368
11	9	8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 9 - 4 - 9 - 4	18289152	164602368
12	9	8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 9 - 4 - 9 - 4	18289152	164602368
13	8	8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	6604416	52835328
14	8	8 - 7 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	6604416	52835328
15	7	15 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	1769040	12383280
16	7	15 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	1769040	12383280
17	7	15 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	1769040	12383280
18	7	15 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	1769040	12383280
19	7	15 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	1769040	12383280
20	7	15 - 6 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	1769040	12383280
21	6	21 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	412776	2476656
22	6	21 - 7 - 6 - 13 - 9 - 4	412776	2476656

23	6	21-7 - 6 - 13 - 9- 4	412776	2476656
24	6	21-7 - 6 - 13 - 9- 4	412776	2476656
25	6	21-7 - 6 - 13 - 9- 4	412776	2476656
26	6	21-7 - 6 - 13 - 9- 4	412776	2476656
27	6	21-7 - 6 - 13 - 9- 4	412776	2476656
28	5	28 - 6 - 13 - 9- 4	78624	393120
29	5	28 - 6 - 13 - 9- 4	78624	393120
30	5	28 - 6 - 13 - 9- 4	78624	393120
31	5	28 - 6 - 13 - 9- 4	78624	393120
32	5	28 - 6 - 13 - 9- 4	78624	393120
33	5	28 - 6 - 13 - 9- 4	78624	393120
34	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
35	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
36	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
37	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
38	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
39	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
40	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
41	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
42	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
43	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
44	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
45	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
46	4	34- 13 - 9- 4	15912	63648
47	3	47 - 9- 4	1692	5076
48	3	47 - 9- 4	1692	5076
49	3	47 - 9- 4	1692	5076

50	3	47 - 9- 4	1692	5076
51	3	47 - 9- 4	1692	5076
52	3	47 - 9- 4	1692	5076
53	3	47 - 9- 4	1692	5076
54	3	47 - 9- 4	1692	5076
55	3	47 - 9- 4	1692	5076
56	2	56- 4	224	448
57	2	56- 4	224	448
58	2	56- 4	224	448
59	2	56- 4	224	448
60	1	60	60	60
			MÁX	11943936000

B₅= {

 {Mecoprop, Propanil, 2,4D, etridiazol}, {methomyl, dazomet, asulam}, {aldicarb, metribuzina},

 {fluometuron, atrazina, methiocarb, difenamida, carbofuran}, {paraquat, quinclorac},

 {trichlorfon, dicamba, quintozone, ziram}, {molinate, EPTC, cyprodinil},

 {pirimicarb, pendimetalina, ethoprophos, terbufos}, {benomyl, norflurazon},

 {chlorotoluron, fludioxonil, quinoxifen, lenacil}, {alacloro, imazetapir},

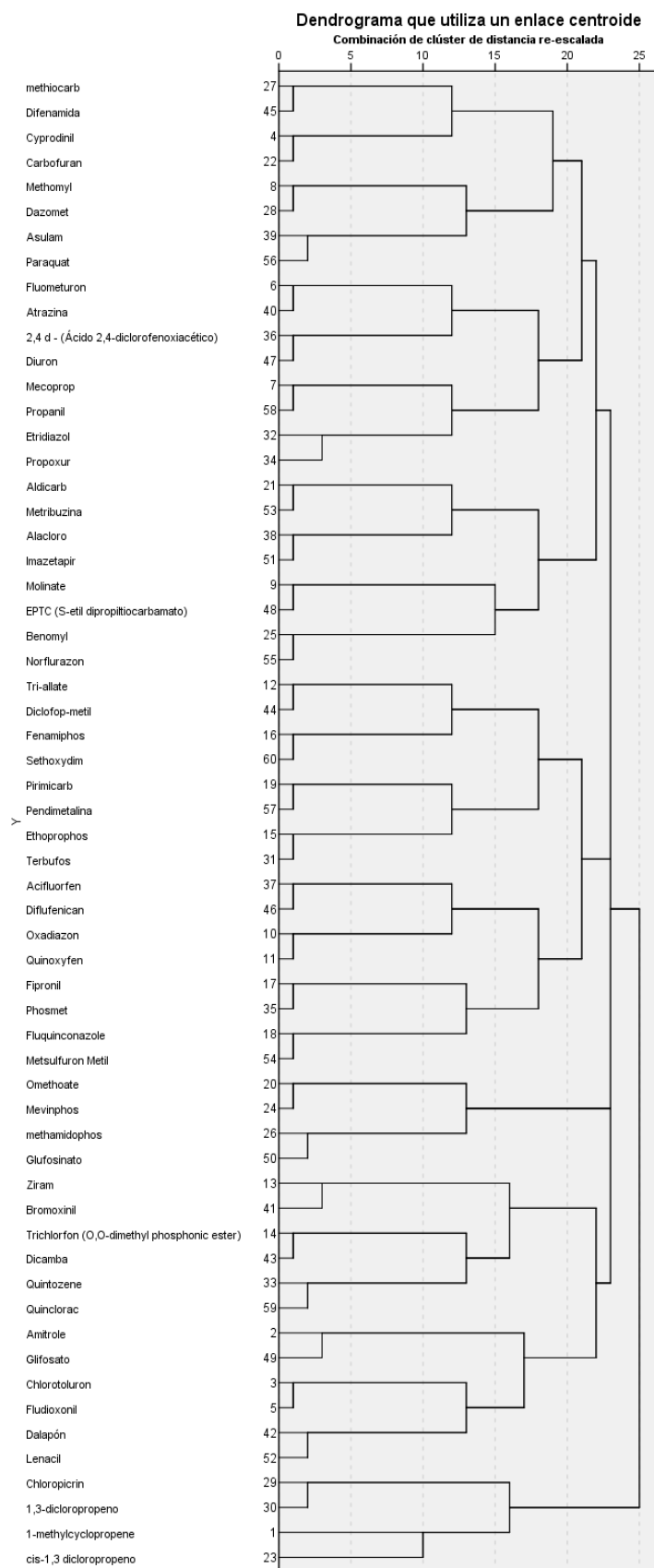
 {trallate, diclofop – metil, fenamiphos}, {acifluorfen, diflufenican, oxadiazon},

 {sethoxydim}, {fluquinconazole, metsulfuron – metil, fipronil, phosmet},

 {omethoate, mevinphos, propoxur, methamidophos, glufosinato}, {amitrole, dalapon, glifosato,

 bromoxinil}, {chloropicrin, 1,3D, Cis1,3D, 1 – MCP}

ANEXO K. Dendrograma con función de similitud Coseno y metodología de agrupamiento centroide



- Extracción de agrupamientos

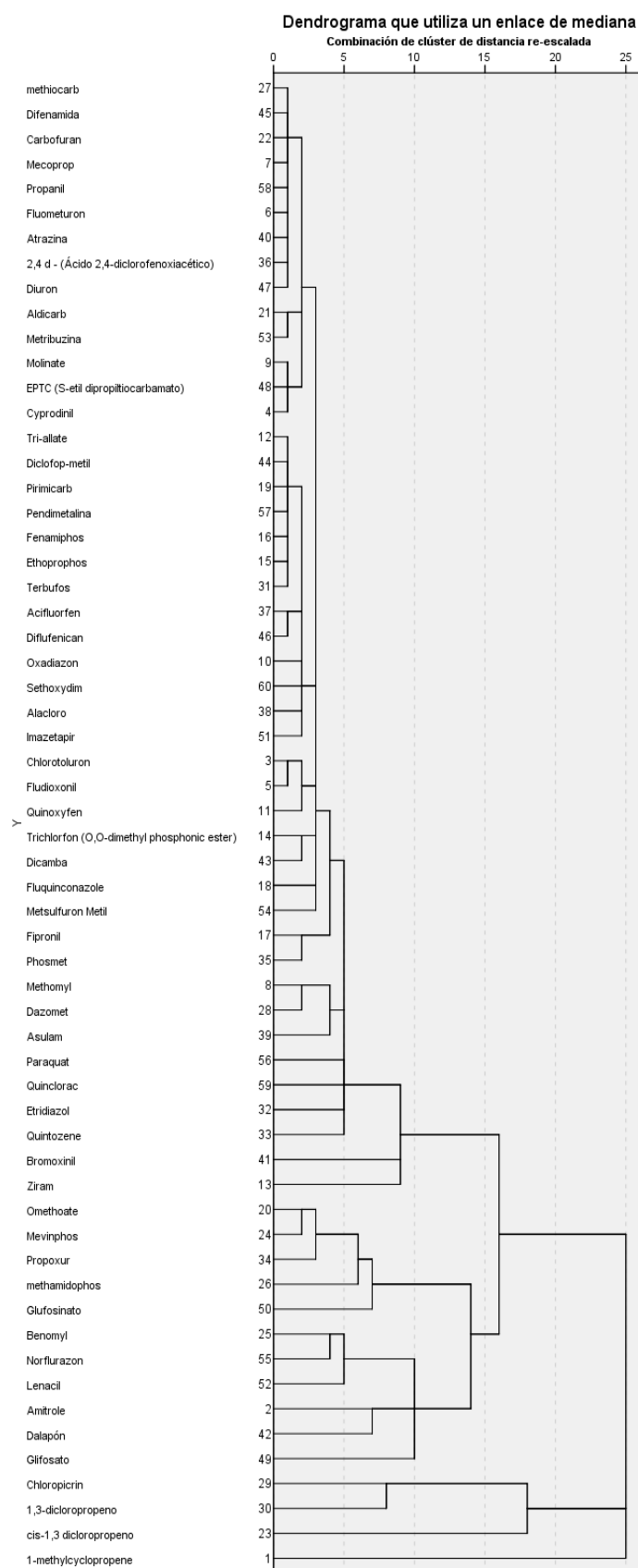
n	C	πс	Producto de πс	S ($C*\sum \pi c$)
1	30	1*1 - 1*1	1	30
2	30	2 - 2- 2 - 2	1073741824	32212254720
3	30	2 - 2- 2 - 2	1073741824	32212254720
4	16	4- 4 - 4 -4 - 4 - 4 - 4 - 4 -4 - 4 -4 - 2 -4 - 2 -4 - 4	1073741824	17179869184
5	16	4- 4 - 4 -4 - 4 - 4 - 4 - 4 -4 - 4 -4 - 2 -4 - 2 -4 - 4	1073741824	17179869184
6	14	4- 4 - 4 -4 - 4 - 4 - 4 - 4 -4 - 4 -4-6 -6 -4	603979776	8455716864
7	14	4- 4 - 4 -4 - 4 - 4 - 4 - 4 -4 - 4 -4-6 -6 -4	603979776	8455716864
8	9	8 - 8 - 8 -8 -8-4-6 -6 -4	18874368	169869312
9	9	8 - 8 - 8 -8 -8-4-6 -6 -4	18874368	169869312
10	9	8 - 8 - 8 -8 -8-4-6 -6 -4	18874368	169869312
11	9	8 - 8 - 8 -8 -8-4-6 -6 -4	18874368	169869312
12	9	8 - 8 - 8 -8 -8-4-6 -6 -4	18874368	169869312
13	9	8 - 8 - 8 -8 -8-4-6 -6 -4	18874368	169869312
14	9	8 - 8 - 8 -8 -8-4-6 -6 -4	18874368	169869312
15	9	8 - 8 - 8 -8 -8-4-6 -6 -4	18874368	169869312
16	6	16 - 8 -16-4-12 -4	393216	2359296
17	6	16 - 8 -16-4-12 -4	393216	2359296
18	6	16 - 8 -16-4-12 -4	393216	2359296
19	6	16 - 8 -16-4-12 -4	393216	2359296
20	6	16 - 8 -16-4-12 -4	393216	2359296
21	6	16 - 8 -16-4-12 -4	393216	2359296

22	6	16 - 8 -16-4-12 -4	393216	2359296
23	6	16 - 8 -16-4-12 -4	393216	2359296
24	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
25	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
26	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
27	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
28	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
29	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
30	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
31	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
32	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
33	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
34	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
35	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
36	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
37	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
38	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
39	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
40	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
41	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
42	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
43	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
44	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
45	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
46	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
47	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
48	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640

49	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
50	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
51	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
52	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
53	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
54	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
55	5	24 -16-4-12 -4	73728	368640
56	2	56 -4	224	448
57	2	56 -4	224	448
58	2	56 -4	224	448
59	2	56 -4	224	448
60	1	60	60	60
			MÁX	32212254720

$$B_2 = \left\{ \begin{array}{l} \{\text{methiocarb, difenamida}\}, \{\text{cyprodinil, carbofuran}\}, \{\text{methomyl, dazomet}\}, \\ \{\text{asulam, paraquat}\}, \{\text{fluometuron, atrazina}\}, \{2,4D, \text{diruon}\}, \\ \{\text{mecoprop, propanil}\}, \{\text{etridiazol, propoxur}\}, \{\text{aldicarb, matribuzina}\}, \\ \{\text{alacoloro, imazetapir}\}, \{\text{molinate, EPTC}\}, \{\text{benomyl, norflurazon}\}, \\ \{\text{triallate, diclofop – metil}\}, \{\text{fenamiphos, sethoxydim}\}, \{\text{pirimicarb, pendimetalina}\}, \\ \{\text{ethoprophos, terbufos}\}, \{\text{acifluorfen, diflufenican}\}, \{\text{oxadiazon, quinoxifen}\}, \\ \{\text{fipronil, phosmet}\}, \{\text{fluquinconazole, metsulfuron – metil}\}, \{\text{omethoate, mevinphos}\} \\ \{\text{methamidophos, glufosinato}\}, \{\text{ziram, bromoxinil}\}, \{\text{trichlorfon, dicamba}\}, \\ \{\text{quintozene, quinclorac}\}, \{\text{amitrole, glifosato}\}, \{\text{chlorotoluron, fludioxonil}\}, \\ \{\text{dalapon, lenacil}\}, \{\text{chloropicrin, 1,3D}\}, \{1 – MCP, Cis 1,3D\} \end{array} \right\}$$

ANEXO L. Dendrograma con función de similitud Coseno y metodología de agrupamiento mediana



- Extracción de agrupamientos

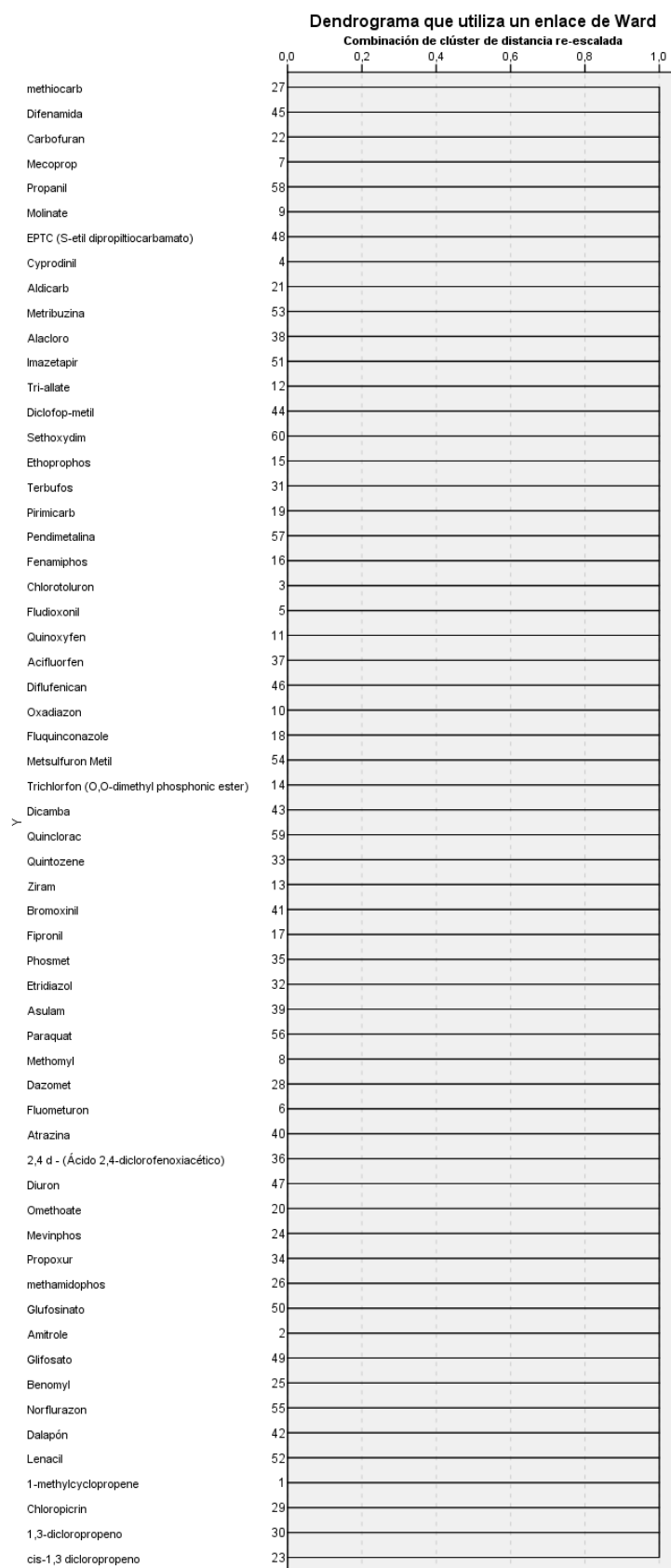
n	C	πс	Producto de πс	S (C*Σπс)
1	34	1*1*1*1*1*1*1*1*1 - 1*1 - 1*1*1 - 1*1*1*1*1*1*1 - 1*1 - 1- 1- 1- 1- 1*1 - 1 - 1*1 - 1- 1- 1*1 - 1*1 - 1- 1- 1- 1- 1- 1*1 - 1- 1- 1- 1- 1- 1*1 - 1- 1- 1- 1*1 - 1- 1	1	34
2	34	1*1*1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 1*1*1 - 1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 1- 1- 1- 1- 2 - 1 - 2 - 1- 1- 2 - 2 - 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 2 - 1- 1- 1- 2 - 1- 2 - 1- 2 - 1- 1	1024	34816
3	29	1*1*1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 3 - 1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 3- 1- 1- 3 - 2 - 1- 3- 1	23328	676512
4	28	1*1*1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 3 - 1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 4- 1- 3 - 2 - 1- 3- 1	31104	870912
5	27	1*1*1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 3 - 1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 5- 3 - 2 - 1- 3- 1	38880	1049760
6	25	1*1*1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 3 - 1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 5- 6- 3- 1	38880	972000
7	25	1*1*1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 3 - 7 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 5- 6- 3- 1	272160	6804000
8	25	1*1*1*1*1*1*1*1*1 - 2 - 3 - 7 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 5- 6- 3- 1	272160	6804000
9	25	9 - 2 - 3 - 7 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 5- 6- 3- 1	2449440	61236000
10	25	9 - 2 - 3 - 7 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 5- 6- 3- 1	2449440	61236000
11	24	9 - 2 - 3 - 7 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	898128	21555072
12	24	9 - 2 - 3 - 7 - 2 - 1- 1- 1- 1- 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	898128	21555072
13	19	9 - 2 - 3 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	898128	17064432
14	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
15	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
16	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
17	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
18	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672

19	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
20	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
21	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
22	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
23	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
24	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
25	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
26	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
27	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
28	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
29	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
30	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
31	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
32	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
33	17	14 - 13 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	216216	3675672
34	12	34- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	6732	80784
35	12	34- 2 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	6732	80784
36	11	36 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	3564	39204
37	11	36 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	3564	39204
38	11	36 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	3564	39204
39	11	36 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	3564	39204
40	11	36 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	3564	39204
41	11	36 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	3564	39204
42	11	36 - 3- 1- 1- 1- 1- 1- 1- 11- 3- 1	3564	39204
43	6	43- 1- 1- 11- 3- 1	1419	8514
44	6	43- 1- 1- 11- 3- 1	1419	8514
45	4	45- 11- 3- 1	1485	5940

46	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
47	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
48	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
49	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
50	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
51	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
52	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
53	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
54	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
55	4	45- 11- 3- 1	1485	5940
56	3	56- 3- 1	168	504
57	3	56- 3- 1	168	504
58	3	56- 3- 1	168	504
59	3	56- 3- 1	168	504
60	1	60	60	60
			MÁX	61236000

$B_9 = \left\{ \begin{array}{l} \{\text{methiocarb, difenamida, carbofuran, mecoprop, propanil, fluometuron, atrazina,} \\ \text{2,4D, diruon}\}, \{\text{aldicarb, metribuzina}\}, \{\text{molinate, EPTC, cyprodinil}\}, \\ \{\text{triallate, diclofop – metil, pirimicarb, pendimetalina, fenamiphos, ethoprophos,} \\ \text{terbufos}\}, \{\text{acifluorfen, diflufenican}\}, \{\text{oxadiazon}\}, \{\text{sethoxydim}\}, \{\text{alacoloro}\}, \\ \{\text{imazetapir}\}, \{\text{chlorotoluron, fludioxonil, quinoxifen}\}, \{\text{trichlorfon, dicamba}\}, \\ \{\text{fluquinconazole}\}, \{\text{metsulfuron – metil}\}, \{\text{fipronil, phosmet}\}, \\ \{\text{methomyl, dazomet, asulam}\}, \{\text{paraquat}\}, \{\text{quinclorac}\}, \{\text{etridiazol}\}, \\ \{\text{quintozene}\}, \{\text{bromoxinil}\}, \{\text{ziram}\}, \{\text{omethoate, mevinphos, propoxur,} \\ \text{methamidophos, glufosinato}\}, \{\text{benomyl, norflurazon, lenacil, amitrole, dalapon,} \\ \text{glifosato}\}, \{\text{chloropicrin, 1,3D, Cis – 1,3D}\}, \{1 – MCP\}, \end{array} \right\}$

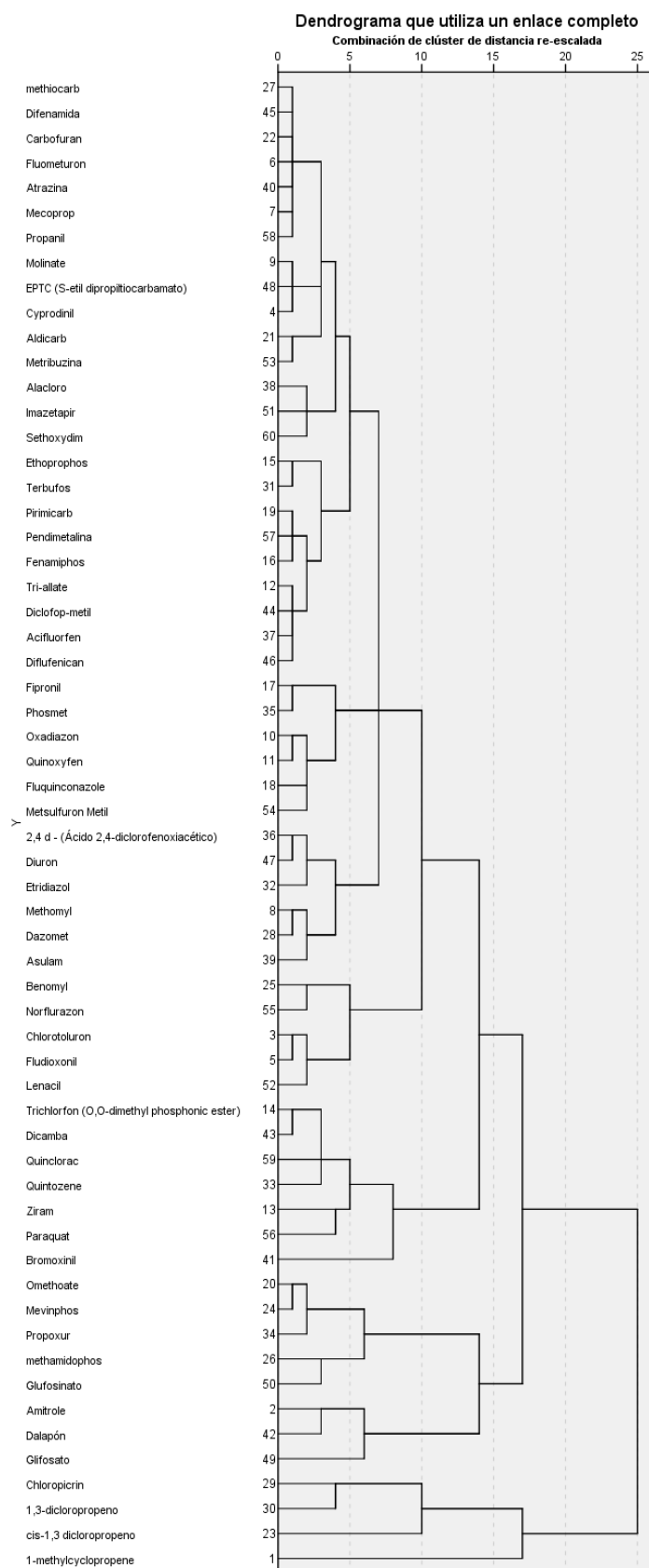
ANEXO M. Dendrograma con función de similitud Coseno y metodología de agrupamiento ward



- Extracción de agrupamientos

[illegible]

ANEXO N. Dendrograma con función de similitud Coseno y metodología de agrupamiento vecino más lejano



- Extracción de agrupamientos

n	C	πc	Producto de πc	S ($C \cdot \sum \pi c$)
1	31	1*1*1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 1*1 - 1*1*1 - 1*1 - 1*1*1 - 1*1*1*1*1 - 1*1 - 1*1 - 1- 1- 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1- 1- 1*1 - 1- 1*1 - 1 - 1*1 - 1*1 - 1 - 1*1 - 1 - 1	1	31
2	31	1*1*1*1*1*1*1 - 1*1*1 - 2 - 1*1*1 - 2- 1*1*1 - 1*1*1*1*1 - 2 - 2 - 1- 1- 2 - 1 - 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 2 - 1- 1- 2 - 1- 2 - 1 - 2 - 2 - 1 - 2 - 1 - 1	16384	507904
3	25	1*1*1*1*1*1*1 - 3 - 2 - 3 - 2- 3- 1*1*1*1 - 2 - 2 - 1- 1- 3 - 3 - 2 - 3 - 2 - 1- 1- 2 - 1- 3 - 2 - 3 - 3 - 1	5038848	125971200
4	20	1*1*1*1*1*1*1 - 3 - 2 - 3 - 2- 3- 4 - 2 - 4- 3 - 3 - 2 - 3 - 4 - 2 - 1- 3 - 2 - 3 - 4	107495424	2149908480
5	18	1*1*1*1*1*1*1 - 3 - 2 - 3 - 2- 3- 4 - 2 - 4- 3 - 3 - 5 - 4 - 2 - 1- 5 - 3 - 4	74649600	1343692800
6	15	1*1*1*1*1*1*1 - 3 - 2 - 3 - 2- 3- 4 - 6- 6 - 5 - 6 - 1- 5 - 3 - 4	27993600	419904000
7	13	7 - 3 - 2 - 3 - 2- 7- 6 - 6 - 5 - 7 - 5 - 3 - 4	133358400	1733659200
8	12	7 - 3 - 2 - 3 - 2- 7- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	71124480	853493760
9	11	7 - 3 - 2 - 3 - 9- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	45722880	502951680
10	11	7 - 3 - 2 - 3 - 9- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	45722880	502951680
11	11	7 - 3 - 2 - 3 - 9- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	45722880	502951680
12	9	12- 3 - 9- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	13063680	117573120
13	9	12- 3 - 9- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	13063680	117573120
14	9	12- 3 - 9- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	13063680	117573120
15	8	15 - 9- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	5443200	43545600
16	7	24- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	967680	6773760
17	7	24- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	967680	6773760
18	7	24- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	967680	6773760
19	7	24- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	967680	6773760
20	7	24- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	967680	6773760
21	7	24- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	967680	6773760
22	7	24- 6 - 6 - 5 - 7 - 8 - 4	967680	6773760

23	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
24	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
25	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
26	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
27	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
28	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
29	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
30	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
31	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
32	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
33	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
34	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
35	7	24- 6- 6 - 5 - 7- 8 - 4	967680	6773760
36	5	36 - 5 - 7- 8 - 4	40320	201600
37	5	36 - 5 - 7- 8 - 4	40320	201600
38	5	36 - 5 - 7- 8 - 4	40320	201600
39	5	36 - 5 - 7- 8 - 4	40320	201600
40	5	36 - 5 - 7- 8 - 4	40320	201600
41	4	41 - 7- 8 - 4	9184	36736
42	4	41 - 7- 8 - 4	9184	36736
43	4	41 - 7- 8 - 4	9184	36736
44	4	41 - 7- 8 - 4	9184	36736
45	4	41 - 7- 8 - 4	9184	36736
46	4	41 - 7- 8 - 4	9184	36736
47	4	41 - 7- 8 - 4	9184	36736
48	3	48- 8 - 4	1536	4608
49	3	48- 8 - 4	1536	4608

50	3	48- 8 - 4	1536	4608
51	3	48- 8 - 4	1536	4608
52	3	48- 8 - 4	1536	4608
53	3	48- 8 - 4	1536	4608
54	3	48- 8 - 4	1536	4608
55	3	48- 8 - 4	1536	4608
56	2	56 - 4	224	448
57	2	56 - 4	224	448
58	2	56 - 4	224	448
59	2	56 - 4	224	448
60	1	60	60	60
			MÁX	2149908480

$B_4 = \left\{ \begin{array}{l} \{\text{methiocarb}\}, \{\text{difenamida}\}, \{\text{carbofuran}\}, \{\text{mecoprop}\}, \{\text{propanil}\}, \{\text{fluometuron}\}, \{\text{atrazina}\}, \\ \{\text{molinate, EPTC, cyprodinil}\}, \{\text{aldicabr, metribuzina}\}, \{\text{alacoloro, imazetapir,} \\ \text{sethoxydim}\}, \{\text{ethoprophos, terbufos}\}, \{\text{pirimicarb, pendimetalina, fenamiphos}\}. \\ \{\text{triallate, diclofop – metil, acifluorfen, diflufenican}\}, \{\text{fipronil, phosmet}\}, \\ \{\text{oxadiazon, quinoxifen, fluquinconazole, matsulfuron – metil}\}, \{\text{2,4D, diuron,} \\ \text{etridiazol}\}, \{\text{methomyl, dazomet, asulam}\}, \{\text{benomyl, norflurazon}\}, \\ \{\text{chlorotoluron, fludioxonil, lenacil}\}, \{\text{trichlorfon, dicamba, quinclorac, quintozone}\}, \\ \{\text{ziram, paraquat}\}, \{\text{bromoxinil}\}, \{\text{omethoate, mevinphos, propoxur}\}, \\ \{\text{methamidophos, glufosinato}\}, \{\text{amitrole, dalapon, glifosato}\}, \\ \{\text{chloropicrin, 1,3D, Cis – 1,3D, 1 – MCP}\} \end{array} \right\}$

ANEXO Ñ. Evidencia de someter los resultados a un congreso nacional



Bogotá, junio, 2021

Emilbus A. Uribe Guerrero, Brayan Rodríguez Blanco, Laura Valentina Rojas Sánchez,
Barón Rodríguez

Universidad Santo Tomás, Bogotá

Estimados investigadores:

Reciban un cordial saludo. En nombre del Comité Científico agradecemos su participación en el **34° Congreso Latinoamericano de Química - CLAQ 2020**, que se realizará en la ciudad de Cartagena de Indias, Colombia, del 11 al 15 de octubre de 2021.

Nos complace comunicarle que su trabajo titulado: "Análisis quimiotopológico de 25 herbicidas regulados por el Instituto Colombiano Agropecuario" con código SLECL-435 ha sido aceptado para presentación Poster.

Le solicitamos confirmar su participación presencial o virtual en el evento antes del 12 de julio de 2021, para la inclusión de su trabajo en el programa académico. Le solicitamos tener en cuenta que los cupos presenciales son limitados.

Cordialmente,

Dr. Harold Ardila
**Presidente Comité Organizador
34° Congreso Latinoamericano de
Química - CLAQ 2020**

Dra. Elena Stashenko
**Presidente Comité Científico 34° Congreso
Latinoamericano de Química - CLAQ 2020**