II Congreso Internacional de Matemática Aplicada a la Ingeniería y Enseñanza de la Matemática en Ingeniería

INMAT 2003

15, 16 y 17 de diciembre 2003

Facultad de Ingeniería

Universidad de Buenos Aires

Paseo Colón 850 (1063)

Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Argentina

Organizado por:

Departamento de Matemática, Facultad de Ingeniería, Universidad de Buenos Aires

Instituto Argentino de Matemática, CONICET

MÉTODOS DE DIFERENCIAS FINITAS APLICADOS A LA TOMA DE NUTRIENTES POR RAÍCES DE CULTIVOS

María A. Dzioba
Departamento Matemáticas, Facultad de Ciencias Exactas
Universidad Nacional de Río Cuarto, Argentina
Juan. C. Reginato
Departamento Química-Física, Facultad de Ciencias Exactas
Universidad Nacional de Río Cuarto, Argentina
Domingo A. Tarzia
Departamento Matemática y CONICET, Facultad Ciencias Empresariales
Universidad Austral (Rosario), Argentina

Palabras claves: diferencias finitas, frontera móvil, toma de nutrientes.

RESUMEN

Se estudia la aplicación del método de diferencias finitas en distintas variantes a un modelo de frontera móvil para la predicción de flujo y toma de nutrientes por raíces de cultivos el cual ha sido previamente formulado. Se aplica el método previa inmovilización de dominio en sus versiones explícita e implícita, así como también la aplicación directa del método en su versión explícita sin inmovilización de dominio. Los resultados obtenidos son comparados con resultados obtenidos por métodos de dominio fijo y de balance integral aplicados a la toma de K, Mg y P por raíces de plantines de pino. Se discute la eficacia y la conveniencia de aplicación de los métodos de diferencias finitas con respecto a otros métodos.

1 INTRODUCCION

En este trabajo se estudia un modelo matemático para el problema de toma de nutrientes a través de las raíces de cultivos. Este problema está relacionado con la fertilización, el desarrollo y la calidad de los mismos. De allí que resulte de gran interés para la producción de cultivos pues un estudio exhaustivo de estos modelos permitirían mejorar la calidad de los mismos.

Para el estudio del transporte y toma de nutrientes se han realizado trabajos en tres direcciones principales: modelos empíricos (estadísticos) y modelos determinísticos. Estos últimos modelan y explican el fenómeno observado matemáticamente. Así se plantean ecuaciones diferenciales de transporte en suelos acopladas con cinéticas de absorción tipo Michaelis-Menten sobre la superficie de las raíces.

Existen algunos modelos debidos a Cushman (1979, 1980, 1982) y a Barber (1984) que estiman la concentración de nutriente en la interfase raíz-suelo y la toma de nutriente resultante pero resueltos sobre dominios fijos.

Mas recientemente, y a partir de modelos y hechos experimentales referidos al transporte y toma de nutrientes se ha estudiado un modelo que vincula la dinámica del trasporte y toma del nutriente con la dinámica del crecimiento de la raíz mediante la formulación de un modelo de frontera móvil (Reginato et al, 2000, Tarzia 1999).

Teniendo en cuenta este modelo y la necesidad de mejorar los resultados numéricos obtenidos por Reginato, se aborda en este trabajo la misma formulación considerando dos esquemas. Por un lado se presenta el método de diferencias finitas con inmovilización del dominio en sus versiones explícito e implícito. Por otro lado, se presenta un método de diferencias finitas sin inmovilización del dominio. En todos los casos los dos esquemas se aplican a la toma de magnesio (Mg), potasio (K) y fósforo (P).

Finalmente se evalúa la eficiencia de ambos métodos comparando las tomas de

nutriente predichas con resultados experimentales obtenidos mediante el balance integral y métodos de dominio fijo. Se obtienen restricciones acerca del tamaño relativo de los pasos temporal y espacial utilizados en cada caso, evidenciándose así las posibles ventajas e inconvenientes de cada uno de los métodos empleados.

El problema de Frontera Móvil

El modelo abordado es un modelo de frontera móvil a una fase (el suelo) en coordenadas cilíndricas ((Reginato et al., 2000).

$$D\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + D(1+\varepsilon_o)\frac{1}{r}\frac{\partial C}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial t}, \quad s_o < r < R(t), \quad 0 < t < T \quad (1.1)$$

$$C(r,0) = \varphi(r), \qquad s_o \le r \le R_o \qquad \textbf{(1.2)}$$

$$-Db\frac{\partial}{\partial r}C(R(t),t) + v_o C(R(t),t) = 0, \quad 0 < t < T \quad (1.3)$$

$$Db\frac{\partial}{\partial r}C(s_o,t) + v_o C(s_o,t) = \frac{k_a[C(s_o,t) - C_u]}{1 + \frac{k_a[C(s_o,t) - C_u]}{J_m}}, \quad 0 < t < T \quad (1.4)$$

$$R(t) = R_o\sqrt{\frac{l_o}{l(t)}}, \qquad 0 < t < T \qquad (1.5)$$

donde **r** es la distancia radial desde el eje de la raíz [cm], **t** es el tiempo [seg], **T** es el tiempo máximo para el cual existe solución [seg], $\mathbf{C_u}$ es la concentración umbral por debajo de la cuál la absorción es nula [mol/cm^3], $\mathbf{v_o}$ es la velocidad efectiva del flujo solución suelo sobre la superficie de la raíz [cm s^{-1}]. **b** es el poder buffer para el nutriente dado. **D** es el coeficiente de difusión efectivo [cm^2 s^{-1}]. $\mathbf{k_a}$ ($=\mathbf{J_m / K_m}$, con $\mathbf{K_m}$ la constante de Michaelis) es el poder de absorción de nutriente [cm s^{-1}]. $\mathbf{J_m}$ es el influjo máximo [mol cm^{-2} s^{-1}], $\mathbf{K_m}$ es la concentración a la cual el influjo es $\mathbf{J_m/2}$ [mol cm^{-3}] **R(t)** es la semidistancia entre ejes de raíces [cm], **?** es el perfil de concentraciones inicial en $\mathbf{[s_o, R_o]}$ [mol cm^{-3}] $\mathbf{R_o}$ es la semidistancia inicial entre ejes de raíces [cm], $\mathbf{s_o}$ es el radio inicial de la raíz [cm], **l(t)** longitud de raíz al tiempo **t** [cm], $\mathbf{l_0}$ es la longitud inicial de la raíz [cm]. [adimensional]. Ec. **(1.1)** es la ecuación de transporte difusivo y convectivo de iones en suelo (nutriente). Ec. **(1.2)** corresponde al perfil de concentraciones iniciales. $\varphi(r) = C_R e^{-\varepsilon(R_o - r)}$, donde C_R es la concentración inicial de ión en solución suelo. Ec. **(1.3)** representa flujo nulo sobre **R(t)** (puede entrar agua pero no nutriente). Ec. **(1.4)** representa el balance de masa sobre la raíz donde los iones son incorporados a través de una cinética tipo Michaelis-Menten. Ec. **(1.5)** representa la frontera móvil **R(t)** en función de la longitud de raíz instantánea **l(t)**, conocida a priori**.**

R(t) se obtiene mediante la exigencia de que el volumen de raíz crecido longitudinalmente sea igual al volumen de raíz crecido radialmente, es decir:

$$V_{\substack{\text{raíz crecido}\\ \text{longitudinalmente}}} = V_{\substack{\text{raíz crecido}\\ \text{radiallmente}}}$$

$$\pi s_o^2\left[l(t) - l_o\right] = \pi l_o\left[s^2(t) - s_o^2\right]$$

siendo $\mathbf{l_o}$ la longitud de raíz inicial, **l(t)** la longitud de raíz al tiempo t, $\mathbf{s_o}$ el radio inicial y **s(t)** el radio al tiempo t. Esta expresión permite vincular el dato experimental **l(t)** con la frontera del dominio **R(t)**.

Se inmoviliza el dominio mediante un cambio de coordenadas llevándolo al intervalo [0, 1] y se resuelve el problema discreto aplicando diferencias finitas en las distintas versiones indicadas. Con ello se obtienen las concentraciones sobre la raíz y con estas se calcula la toma total de nutriente Δ **U(t)** a partir de la fórmula: (Reginato J.C. y Tarzia D.A., 2002).

$$\Delta U = 2\pi s_o l_o \int_0^{t_{max}} J(C)dt + 2\pi s_o \int_0^{t_{max}}\left[\int_t^{t_{max}} J(C)ds\right]\dot{l}(t)dt$$

$$\text{con } J(C) = \frac{k_a\left[C(s_o,t) - C_u\right]}{1 + \frac{k_a\left[C(s_o,t) - C_u\right]}{J_m}}$$

donde $\mathbf{J_c(t)}$ es el influjo, $\dot{l}(t)$ es el ritmo de crecimiento longitudinal de la raíz y Δ **U(t)** se calcula desde t = 0 a t = t_{max}. Los distintos métodos han sido programados en FORTRAN y en el método de diferencias finitas implícito se adaptaron las subrutinas corrientes para resolver sistemas tridiagonales (Vetterling W., Teukolsky S.,Press W. y Flannery B.,1996; Shoichiro Nakamura,1992). Los resultados obtenidos se muestran en la tabla comparativa a continuación:

		Toma predicha (mmol/maceta)									
Ion	Toma Medida (mmol/ maceta	Modelo de Barber-Cushman		Modelo Frontera Móvil (Balance Integral)		Modelo Frontera Móvil (Inm..Dom. / Dif. Finitas Explícito)		Modelo Frontera Móvil (Inm.Dom. / Dif. Finitas Implícito		Modelo Frontera Móvil (Dom. Var. / Dif. Finitas Explícito)	
			% Error		% Error		% Error		% Error		%Error
Mg	1.617	0.625	61.3	0.680	57.1	0.18	88.9	0.763	52.8	0.687	57.5
K	6.663	6.285	5.6	6.653	0.15	7.33	9.96	7.272	9.15	0.582	91.3
P	1.332	1.185	11	1.302	2.25	1.41	6	1.409	5.84	0.683	51.5

Los resultados muestran que el método el balance integral produce mejores resultados para K y P que el modelo de Barber-Cushman aunque para Mg ambos modelos producen una pobre predicción debido probablemente al uso de altos valores para J_m obtenidos mediante determinaciones experimentales del mismo en soluciones nutritivas y no en suelo. (Rengel y Robinson, 1993)

Los resultados finales que se exponen en la Tabla, corresponden a los valores más representativos que se obtuvieron. El método de diferencias finitas en las versiones explícita e implícita produce resultados similares al método de balance integral para toma de potasio (K) y fósforo (P). El método implícito reduce imperceptiblemente el error con respecto al método explícito, pero el método del Balance Integral sigue siendo el que mejor aproxima el valor experimental en este modelo.

REFERENCIAS

1) Barber S.A. y Cushman J. *Nitrogen uptake model for agronomic crops*. In Modeling Waste-Water Renovation-Land Treatment. Ed.I.K. Iskanda, 382-409, Wiley-Interscience, New York (1981).

2) Barber S.A. *Soil nutrient bioavailability. A mechanistic approach*, J. Wiley, New York (1984)

3) Cushman J.H. *An analytical solution to solute transport near root surfaces for low initial concentrations: I. Equation development*, Soil Sc. Soc. Am. J. 43, 1979, pags.:1087-1090

4) Crank J. *Free and Moving Boundary Problems*. Clarendon Press, Oxford (1984)

5) Cushman J.H. *Analitical study of the effect of ion depletion caused by microbial activity near a root.*Soil Science, 129, 2: 69-87 (1980).

6) Cushman J.H. *Nutrient transport inside and outside the root rhizosfere.*Soil Sc. Soc. Am.J.,46, 4: 704-709 (1982).

7) Morton K.W., Mayers D.F. *Numerical Solutions of Partial Differential Equations*, Cambridge University Press (1994)

8) Reginato, J.C.; Tarzia, D.A.; Cantero, A. *On the free boundary problem for the Michaelis-Menten absorption model for root growth.* Soil Sc. 150, 1990, pags.:722-729

9) Reginato, J.C.; Tarzia, D.A.; Dzioba, M.A. *Analytical study of the effect of some soil and plant parameters on root growth due to absorption of one mobile ion: A free boundary model*, Plant and Soil, 157, 1993, pags.:185-196

10) Reginato, J.C.; Tarzia, D.A. *The balance integral method applied to root growth of crops*. Int. J. of Eng. Sc. 31, 1, 1993, pags.:61-70

11) Reginato J.C.*Modelos de Frontera Libre y Móvil, Toma de Nutrientes y Crecimiento de Raíces de Cultivos.*Tesis de Doctorado en Física, Univ. Nac. Rosario, Rosario (1999).

12) Reginato J.C; M.C. Palumbo, Ch.I. Bernardo, I.S. Moreno y D.A. Tarzia. *Modeling Nutrient Uptake Using A Moving Boundary Approach. Comparison with the Barber-Cushman Model, Soil Science Society of America Journal,* 64, 2000, pags.:1363-1367

13) Rengel Z. y D. L. Robinson. *Modeling magnesium uptake from an acid soil.* II. Barber Cushman model. Soil Sci. Soc. Am. J. 54, 1990, pags.:791-795

14) Reginato, J. C. y D. A. Tarzia. 2002. *An alternative formula to compute the nutrient uptake.* Communications in Soil Science and Plant Analysis, 33(5&6), 821-830

15) Vetterling W.T.; Teukolsky, S.A.; Press, W.H.; Flannery, B.P. *Numerical Recipes in Fortran 77. The Art of Scientific Computing*, Vol. 1, Cambridge University Press (1996).