

ANALES AFA

Vol. 4

BUENOS AIRES

1992

PUBLICACION DE LA ASOCIACION FISICA ARGENTINA

ISSN 0327-358X

ANALES AFA

Volumen 4

**77° Reunión de la Asociación Física de la Argentina
Buenos Aires - 1992**

PUBLICACION DE LA ASOCIACION FISICA ARGENTINA

EFFECTO DE ALGUNOS PARAMETROS DEL SISTEMA SUELO PLANTA SOBRE EL CRECIMIENTO DE RAICES DE CULTIVOS DEBIDO A LA ABSORCION DE N-IONES. UN MODELO DE FRONTERA LIBRE.

J.C.Reginato.

Departamento Química-Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de Río Cuarto, Enlace Rutas 8 y 36 -km 603 (5800) Río Cuarto, Córdoba.

D.A.Tarzia.

Departamento de Matemáticas, FCE, Universidad Austral, Paraguay 1950, (2000) Rosario, y PROMAR (CONICET - UNR), Avda. Pellegrini 250, (2000) Rosario.

Se plantea un modelo de crecimiento de raíces de cultivos debido a la absorción de p-iones poco móviles y q-iones móviles a través de un problema de frontera libre. Se estudia los efectos resultantes de diferencias en disponibilidad y transporte de nutrientes a través de la rizósfera producidos por una absorción activa tipo Michaelis-Menten. Las ecuaciones del modelo son resueltas mediante el método del balance integral y las soluciones numéricas permiten estimar el crecimiento radial de raíces así como la concentración de nutrientes sobre la misma. Para bajas y altas concentraciones se encuentra un ritmo de crecimiento lineal a diferencia de lo que ocurre a concentraciones intermedias. Ejemplos de concentraciones para el caso particular de 2 iones (uno poco móvil y otro móvil) sobre la interfase raíz-suelo en función del radio de la raíz y radio raíz versus tiempo son mostrados para el rango de bajas concentraciones.

I. INTRODUCCION

En artículos recientes¹⁻⁴ ha sido propuesto un método para calcular el crecimiento de raíces debido a la absorción de un único nutriente a través de un problema de frontera libre⁹. En estos artículos la interfase raíz-suelo $s(t)$ vs. t así como la concentración sobre la interfase $C(s)$ vs. s para iones poco móviles¹⁻³ e iones móviles⁴ a bajas concentraciones fueron calculadas a través del método cuasi-stacionario⁵. Además, $C(s(t), t)$ como una función explícita de $s(t)$ y el tiempo t , así como $s(t)$ vs. t han sido calculados (para iones móviles y poco móviles) a través del método del balance integral⁵⁻⁷. El objetivo del presente trabajo es calcular $s(t)$ en función de t y la concentración sobre la interfase $C_i(s(t), t)$ en función de $s(t)$ y t debido a la absorción de n iones poco móviles y móviles mediante el método del balance integral, estimando el efecto de diferentes parámetros del sistema suelo-plantas sobre el crecimiento de raíces.

II. ANALISIS

Como es usual^{1-4,10} se asume una raíz cilíndrica inmersa en un suelo homogéneo e isotrópico en condiciones de humedad, temperatura y luz constantes. El ritmo de toma de iones es descripto por

cinéticas activas del tipo Michaelis-Menten, donde los influjos máximos (J_{m_i}) y las constantes de Michaelis (K_{m_i}) son independientes de la velocidad de flujo del agua del suelo sobre la raíz (v_0). El transporte de nutriente ocurre vía convección y difusión en la dirección radial únicamente (para simplificar la geometría). En la solución suelo hay difusión. Los coeficientes de difusión (D_i) y los poderes buffer b_i son independientes de las concentraciones. J_{m_i} , k_i (poder de absorción $k_i = J_{m_i}/K_{m_i}$), o E_i (eflujo) y no cambian con la edad de la raíz. Los coeficientes D_i son independientes del flujo y v_0 no es afectada por las concentraciones de los iones. Se considera nula la producción o depleción de nutrientes por actividad microbiana y a todo el nutriente incorporado como disponible para el crecimiento de la raíz (independiente del metabolismo vegetal). Las cinéticas de absorción de iones se consideran independientes entre sí, es decir no competitivas. Se asume que $R_1, R_2, \dots, R_n$ son radios rizósfericos fijos para los iones móviles y poco móviles con $R_j < R_k$, donde j corresponde a iones poco móviles y k a iones móviles. El siguiente problema de frontera libre tiene significado matemático en el dominio $s(t) < r < R_j$, $0 < t < T = \min(R_1, \dots, R_n)$. Desde un punto de vista físico se reemplaza la información de C_i o el flujo (con i distinto del

correspondiente al $R_{\min}$) sobre $r = R_i$ (lo cual es a priori incógnita) para $0 < t < T$ por la información de C_i o el flujo nulo sobre R_i para $0 < t < T$. Debido al método aproximado utilizado para la solución, podemos definir $C_i = C_i(r, t)$ para $s(t) < r < R_i$, $0 < t < T$. Así, el modelo de crecimiento de la raíz se expresa en el siguiente problema de frontera libre (en coordenadas cilíndricas) donde las ecuaciones de transporte para los n -iones están dadas por:

$$i) \quad D_i C_{i,r} + D_i (1 + \epsilon_i) \frac{C_{i,r}}{r} = C_{i,t}, \quad s(t) < r < R_i, \\ 0 < t < T, \quad i = 1, \dots, n$$

las condiciones iniciales para los n -iones móviles y poco móviles son:

$$ii) \quad C_i(r, 0) = \Phi_i(r), \\ s_0 \leq r \leq R_i, \quad i = 1, \dots, n$$

las condiciones de contorno para los p -iones poco móviles son:

$$ii) \quad C_i(R_i, t) = C_{i\infty}, \\ 0 < t < T, \quad i = 1, \dots, p$$

y las condiciones de contorno para $q = (n-p)$ iones móviles son:

$$v) \quad -D_{ib} b_i C_{i,r}(R_i, t) + v_0 C_i(R_i, t) = 0, \\ 0 < t < T, \quad i = p+1, \dots, n$$

las condiciones de balance de masa sobre la interfase raíz-suelo son:

$$vi) \quad D_i b_i C_{i,r}(s(t), t) + v_0 C_i(s(t), t) = \\ = \frac{k_i C_i(s(t), t)}{1 + \frac{k_i}{J_{m_i}} C_i(s(t), t)} - E_i, \quad i = 1, \dots, n$$

$$vii) \quad \sum_{i=1}^n \frac{k_i C_i(s(t), t)}{1 + \frac{k_i}{J_{m_i}} C_i(s(t), t)} - \\ - \sum_{i=1}^n E_i \left[\sum_{i=1}^n a_i C_i(s(t), t) \right] \frac{ds(t)}{dt}, \quad i = 1, \dots, n$$

y la condición inicial para la frontera libre $s(t)$:

$$viii) \quad s(0) = s_0, \quad 0 < s_0 < R_1 < \dots < R_n \quad (1)$$

donde:

$$C_{i,r} = \partial C_i / \partial r, \quad C_{i,rr} = \partial^2 C_i / \partial r^2, \quad C_{i,t} = \partial C_i / \partial t,$$

r es la coordenada posición, t es el tiempo, T es el tiempo para el cual existe solución, i es la ecuación de transporte de Cushman¹⁰ para el ion i -ésimo, $s(t) = ds(t)/dt$ es la velocidad de crecimiento, a_i es el coeficiente estequiométrico para el i -ésimo ion y s_0 es el radio inicial. Los parámetros ϵ_i están dados por:

$$\epsilon_i = v_0 s_0 / D_i b_i > 0.$$

Las $\Phi_i(r)$ son los perfiles de concentraciones iniciales.

Las n condiciones sobre la frontera libre (1-vi-vii) pueden ser escritas:

$$C_{i,r}(s(t), t) = g_i(C_i(s(t), t)) = \\ = \frac{1}{D_i b_i} \left[\frac{k_i C_i(s(t), t)}{1 + \frac{k_i}{J_{m_i}} C_i(s(t), t)} - v_0 C_i(s(t), t) - E_i \right], \quad (2) \\ C_i > 0, \quad t > 0$$

$$s(t) = f(C_i(s(t), t)) = \\ = \frac{1}{\left[\sum_{i=1}^n a_i C_i \right]} \left[\sum_{i=1}^n \frac{k_i C_i(s(t), t)}{1 + \frac{k_i}{J_{m_i}} C_i(s(t), t)} - \sum_{i=1}^n E_i \right], \quad (3) \\ C_i > 0, \quad t > 0$$

las cuales satisfacen las siguientes propiedades:

$$g_i(C_i) > 0 \Leftrightarrow C_i > C_{m_i} = \frac{E_i}{k_i - v_0} \quad (4)$$

con $k_i > v_0$, $i = 1, \dots, n$

$$f(C_1, \dots, C_n) > 0 \Leftrightarrow \sum_{i=1}^n \frac{k_i C_i(s(t), t)}{1 + \frac{k_i}{J_{m_i}} C_i(s(t), t)} > \sum_{i=1}^n E_i, \quad (5) \\ i = 1, \dots, n$$

Para resolver (1) (esto es, calcular $C_i = C_i(r, t)$ y en particular $C_i = C_i(s(t), t)$ y la frontera libre $r = s(t)$ (a

priori desconocida) aplicamos el método del balance integral^{6,7}, integrando las ecuaciones diferenciales parciales (1-i) en la variable r sobre el dominio $(s(t), R_i)$ respectivamente:

$$\int_{s(t)}^{R_i} C_i(r, t) dr = D_i \int_{s(t)}^{R_i} C_{i,r}(r, t) dr + D_i(1 + \varepsilon_i) \int_{s(t)}^{R_i} \frac{C_{i,r}(r, t)}{r} dr, \quad (6)$$

$i = 1, \dots, n$

y proponemos:

$$C_i(r, t) = \Phi_i(r)[1 + \beta_i(t)(R_i - r)^2] \quad (7)$$

con Φ_i y β_i a determinar, $i = 1, \dots, n$

las cuales dependen de los parámetros del sistema a través y satisfacen las condiciones iniciales 1-ii) para los n -iones, las condiciones de contorno 1-iii) para los p -iones poco móviles y las condiciones de contorno 1-iv) para los $(n-p)$ iones móviles, esto es:

$$C_i(r, 0) = \Phi_i(r), \quad \forall r \in [s_0, R_i] \Leftrightarrow \beta_i(0) = 0, \quad (8)$$

$i = 1, \dots, n$

$$C_i(R_i, t) = C_{i,\infty}, \quad 0 < t < T \quad \Leftrightarrow \Phi_i(R_i) = C_{i,\infty}, \quad (9)$$

$i = 1, \dots, n$

$$\begin{aligned} -D_i b_i C_{i,r}(R_i, t) + v_0 C_i(R_i, t) &= 0 \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow -D_i b_i \Phi_i'(R_i) + v_0 \Phi_i(R_i) &= 0 \end{aligned} \quad (10)$$

$i = p+1, \dots, n$

Denotando $\alpha_i = \alpha_i(t)$ por:

$$\begin{aligned} \alpha_i(t) &= C_i(s(t), t) = \\ &= \Phi_i(s(t), t)[1 + \beta_i(t)(R_i - s(t))^2] \end{aligned} \quad (11)$$

las cuales dependen de los parámetros del sistema a través de $s(t)$, $\Phi_i(s(t))$ y $\beta_i(t)$. Reemplazando (5), (10) en (6), el problema (1) se reduce a:

$$\begin{aligned} \int_{s(t)}^{R_i} C_{i,r}(r, t) dr &= D_i [C_{i,r}(R_i, t) - g_i(\alpha_i(t))] + \\ &+ D_i(1 + \varepsilon_i) \left[\frac{C_{i,\infty}}{R_i} - \frac{\alpha_i(t)}{s(t)} + \int_{s(t)}^{R_i} \frac{C_i(r, t)}{r^2} dr \right], \end{aligned}$$

$i = 1, \dots, p$

$$\begin{aligned} \int_{s(t)}^{R_i} C_{i,r}(r, t) dr &= D_i [C_{i,r}(R_i, t) - g_i(\alpha_i(t))] + \\ &+ D_i(1 + \varepsilon_i) \left[\frac{\Phi_i(R_i)}{R_i} - \frac{\alpha_i(t)}{s(t)} + \int_{s(t)}^{R_i} \frac{C_i(r, t)}{r^2} dr \right], \end{aligned}$$

$i = p+1, \dots, n$

$$\dot{s}(t) = f(\alpha_1(t), \dots, \alpha_n(t)), \quad s(0) = s_0 \quad t > 0 \quad (12)$$

Reemplazando (11) en (12), para el caso de $n=2$ con un ion poco móvil y un ion móvil y la aproximación de bajas concentraciones para ambos, obtenemos el siguiente sistema de tres ecuaciones diferenciales acopladas (válidas para los casos $\varepsilon \neq 1, 2, 3$):

$$\begin{aligned} \frac{d\beta_i(t)}{dt} &= \frac{F_1 + F_2 + D_1 + (1 + \varepsilon_i)(F_3 + F_4 + F_5 + F_6 + F_7)}{(F_8 + F_9 + F_{10})}, \\ \beta_i(0) &= 0, \quad i = 1, \dots, p \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\beta_i(t)}{dt} &= \frac{F_{11} + F_{12} + F_{13} + D_2(1 + \varepsilon_i)(F_{14} + F_{15} + F_{16} + F_{17})}{(F_8 + F_9 + F_{20})}, \\ \beta_i(0) &= 0, \quad i = p+1, \dots, n \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{ds(t)}{dt} &= \frac{1}{\left[\sum_{i=1}^n a_i C_i \right]} \left[\sum_{i=1}^n \frac{k_i C_i(s(t), t)}{1 + \frac{k_i}{J_{m_i}} C_i(s(t), t)} - \sum_{i=1}^n E_i \right], \\ s(0) &= 0, \quad i = 1, \dots, n \end{aligned}$$

donde:

$$\Phi_i(r) = C_{i,\infty} + A \left[1 - \left(\frac{R_i}{r} \right)^{\varepsilon_i} \right], \quad \text{con: } A = \frac{E_i - (k_i - v_0) C_{i,\infty}}{k_i \left[1 - \left(\frac{R_i}{s_0} \right)^{\varepsilon_i} \right] - v_0},$$

$i = 1, \dots, p$

$$\Phi_i(r) = FB - \frac{F}{r^{\epsilon_i}}, \quad \text{con: } B = \frac{1}{R_i^{\epsilon_i}} \left[1 + \frac{s_0}{R_i} \right], \quad F = \frac{E_i}{(k_i - v_0)B - \frac{k_i}{s_0^{\epsilon_i}}},$$

$$i = p+1, \dots, n.$$

Los perfiles de concentraciones iniciales $\Phi_i(r)$ dados por (4) han sido calculados a través del método cuasis-estacionario ^{1,2} para bajas concentraciones y son determinadas por el sistema similarmente a las predicciones de Cushman⁸, aunque otras funciones pueden ser útiles como perfiles iniciales. Las funciones F_i válidas para $i = 1, \dots, p$ están dadas por:

$$F_1 = \frac{D_i A \epsilon_i}{R_i} + D_i (1 + \epsilon_i) \left[\frac{C_{i\infty}}{R_i} \frac{\Phi_i(s(t)) [1 + \beta_i(t) (R_i - s(t))^2]}{s(t)} \right],$$

$$F_2 = -\frac{1}{b_i} \left[(k_i - v_0) \Phi_i(s(t)) [1 + \beta_i(t) (R_i - s(t))^2] - E_i \right],$$

$$F_3 = (C_{i\infty} + A) \beta_i(t) [R_i - s(t)] - 2(C_{i\infty} + A) \beta_i(t) R_i \ln \left[\frac{R_i}{s(t)} \right],$$

$$F_4 = (C_{i\infty} + A) \left[1 + \beta_i(t) R_i^2 \right] \left[\frac{1}{s(t)} - \frac{1}{R_i} \right],$$

$$F_5 = -\frac{A [R_i^{\epsilon_i} + \beta_i(t) R_i^{\epsilon_i+2}]}{(\epsilon_i + 1)} \left[\frac{1}{s^{(\epsilon_i+1)}(t)} - \frac{1}{R_i^{(\epsilon_i+1)}} \right],$$

$$F_6 = \frac{2}{\epsilon_i} A \beta_i(t) R_i^{\epsilon_i+1} \left[\frac{1}{s^{\epsilon_i}(t)} - \frac{1}{R_i^{\epsilon_i}} \right],$$

$$F_7 = \frac{A \beta_i(t) R_i^{\epsilon_i}}{(1 - \epsilon_i)} \left[\frac{1}{s^{(\epsilon_i-1)}(t)} - \frac{1}{R_i^{(\epsilon_i-1)}} \right],$$

$$F_8 = (C_{i\infty} + A) R_i^2 [R_i - s(t)] - \frac{A R_i^{\epsilon_i+2}}{(1 - \epsilon_i)} [R_i^{(1-\epsilon_i)} - s^{(1-\epsilon_i)}(t)],$$

$$F_9 = (C_{i\infty} + A) R_i [R_i^2 - s^2(t)] + \frac{2 A R_i^{\epsilon_i+1}}{(2 - \epsilon_i)} [R_i^{(2-\epsilon_i)} - s^{(2-\epsilon_i)}(t)],$$

$$F_{10} = \frac{(C_{i\infty} + A)}{3} [R_i^3 - s^3(t)] - \frac{A R_i^{\epsilon_i}}{(3 - \epsilon_i)} [R_i^{(3-\epsilon_i)} - s^{(3-\epsilon_i)}(t)],$$

Las funciones F_i válidas para $i = p+1, \dots, n$ están dadas por:

$$F_{11} = \left[\frac{v_0}{b_i} + \frac{D_i (1 + \epsilon_i)}{R_i} \right] \frac{F s_0}{R_i^{\epsilon_i+1}},$$

$$F_{12} = \frac{1}{b_i} \left[(k_i - v_0) \Phi_i(s(t)) [1 + \beta_i(t) (R_i - s(t))^2] - E_i \right],$$

$$F_{13} = -D_i (1 + \epsilon_i) \frac{\Phi_i(s(t)) [1 + \beta_i(t) (R_i - s(t))^2]}{s(t)},$$

$$F_{14} = FB \left[1 + \beta_i(t) R_i^2 \right] \left[\frac{1}{s(t)} - \frac{1}{R_i} \right] - 2FB \beta_i(t) R_i \ln \left[\frac{R_i}{s(t)} \right] + FB \beta_i(t) [R_i - s(t)],$$

$$F_{15} = -\frac{F [1 + \beta_i(t) R_i^2]}{(\epsilon_i + 1)} \left[\frac{1}{s^{(\epsilon_i+1)}(t)} - \frac{1}{R_i^{(\epsilon_i+1)}} \right],$$

$$F_{16} = \frac{2}{\epsilon_i} F \beta_i(t) R_i \left[\frac{1}{s^{\epsilon_i}(t)} - \frac{1}{R_i^{\epsilon_i}} \right],$$

$$F_{17} = \frac{F \beta_i(t)}{(1 - \epsilon_i)} \left[\frac{1}{s^{(\epsilon_i-1)}(t)} - \frac{1}{R_i^{(\epsilon_i-1)}} \right],$$

$$F_{18} = FB R_i^2 [R_i - s(t)] - \frac{F R_i^2}{(1 - \epsilon_i)} [R_i^{(1-\epsilon_i)} - s^{(1-\epsilon_i)}(t)],$$

$$F_{19} = -FB R_i [R_i^2 - s^2(t)] + \frac{2 F R_i}{(2 - \epsilon_i)} [R_i^{(2-\epsilon_i)} - s^{(2-\epsilon_i)}(t)],$$

$$F_{20} = \frac{FB}{3} [R_i^3 - s^3(t)] - \frac{F}{(3 - \epsilon_i)} [R_i^{(3-\epsilon_i)} - s^{(3-\epsilon_i)}(t)],$$

Puede probarse que para el caso particular $\epsilon = 1, 2$ y 3, puede obtenerse un sistema similar a ⁽¹³⁾ de $(n+1)$ ecuaciones diferenciales ordinarias.

La solución del sistema ⁽¹³⁾ es resuelta numéricamente a través del método de Runge-Kutta para un sistema de tres ecuaciones diferenciales ordinarias. Las Figs. 1 a 6 representan resultados teóricos para la concentración de la interfase raíz-suelo $C(s(t), t)$ vs. s y posición de la interfase $s(t)$ vs. t en función del poder de absorción k para un ion poco móvil y un ion móvil. Las curvas han sido calculadas para valores de parámetros del sistema que cumplen condiciones

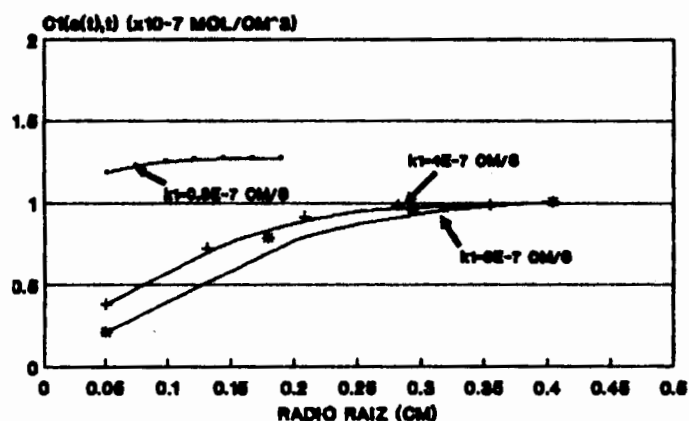


Fig. 1: Concentración Interface para el Ion poco móvil 1 vs. radio raíz en función del poder de absorción k_1 .

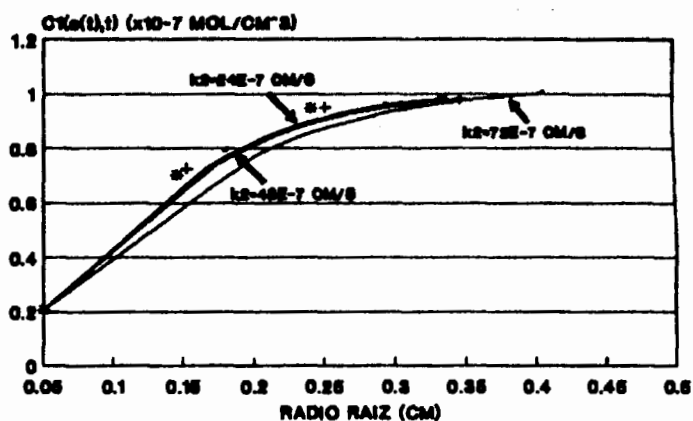


Fig. 4: Concentración Interface para el Ion poco móvil 1 vs. radio raíz en función del poder de absorción k_2 .

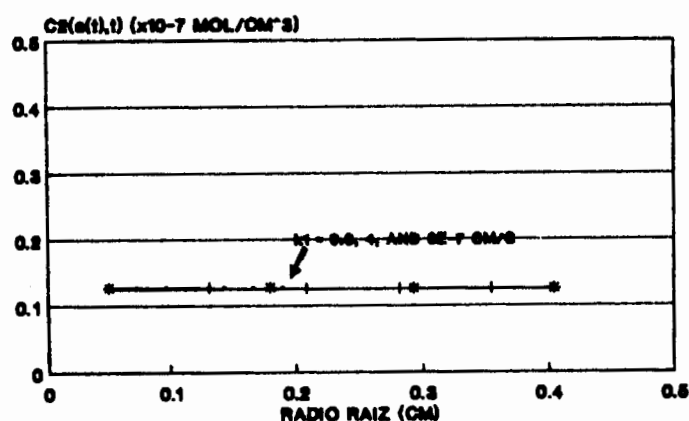


Fig. 2: Concentración Interface para el Ion móvil 2 vs. radio raíz en función del poder de absorción k_1 .

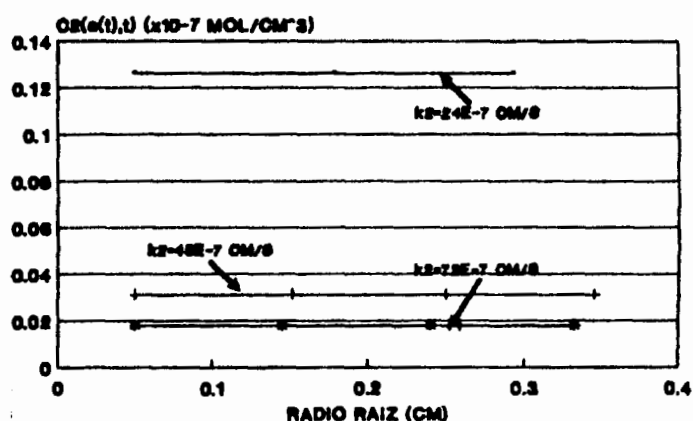


Fig. 5: Concentración Interface para el Ion móvil 1 vs. radio raíz en función del poder de absorción k_2 .

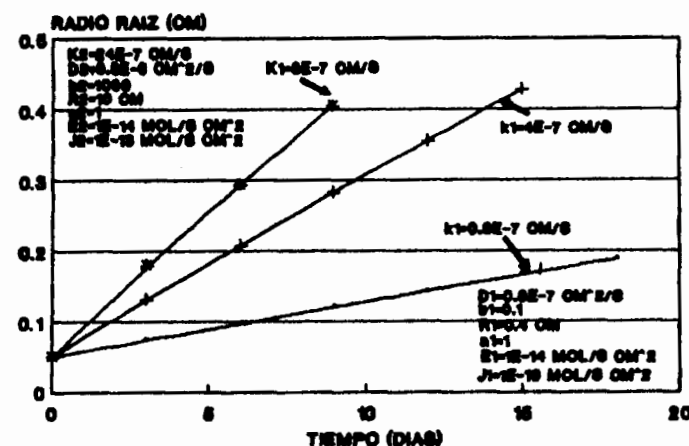


Fig. 3: Concentración vs. tiempo en función del poder de absorción k_1 .

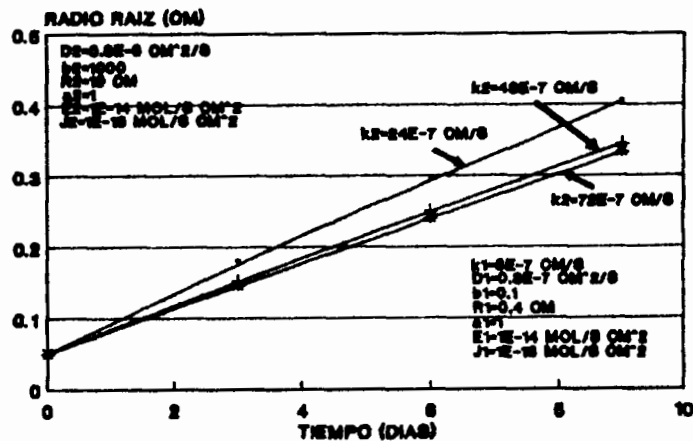


Fig. 6: Radio raíz vs. tiempo en función del poder de absorción k_2 .

III. CONCLUSIONES

Del análisis de $s(t) = ds(t)/dt$ y la absorción neta $A_i = (k_i C_i(s(t), t) - E_i)$ para los resultados mostrados en los gráficos (notando 1 para el ion poco móvil y 2 para el ion móvil), se concluye: $s(t)$ y A_1 aumentan mientras A_2 no varía cuando k_1 aumenta (Figs. 1, 2 y 3) mientras que $s(t)$ y A_2 disminuyen mientras A_1 no varía cuando k_2 aumenta (Figs. 4, 5 y 6).

De un análisis mas exhaustivo de los resultados numéricos para los parámetros restantes, concluimos: $s(t)$ disminuye y A_1 aumenta mientras A_2 no varía cuando C_{1*} aumenta. $s(t)$ no varía cuando D_1 o D_2 aumentan, aunque A_1 aumenta mientras A_2 no varía cuando D_1 aumenta y A_2 casi no varía mientras A_1 no varía cuando D_2 aumenta. $s(t)$ disminuye y A_1 aumenta tendiendo a igualarse cuando b_1 aumenta mientras $s(t)$ aumenta y A_2 aumenta tendiendo a igualarse cuando b_2 aumenta. $s(t)$, A_1 y A_2 aumentan cuando J_1 o J_2 aumentan. $s(t)$ aumenta y A_1 disminuye cuando R_1 aumenta mientras $s(t)$ y A_2 aumentan cuando R_2 aumenta. $s(t)$, A_1 y A_2 aumentan cuando v_0 aumenta.

El comportamiento cualitativo mostrado para estos parámetros puede variar si otro conjunto de valores para los parámetros del sistema son usados. El presente trabajo constituye una aproximación teórica para predecir la toma de nutrientes y una herramienta

de partida en el diseño de tecnologías para la optimización de funcionamiento de cultivos.

REFERENCIAS

1. J.C. Reginato, D.A. Tarzia, A. Cantero, Soil Science, **150** (4), 722-729. (1990)
2. J.C. Reginato, D.A. Tarzia, A. Cantero, Soil Science, **152**, 2, 63-71. (1991)
3. J.C. Reginato, D.A. Tarzia, A. Cantero, Anales AFA, **1**, 351-354. (1989)
4. J.C. Reginato, D.A. Tarzia, M.A. Dzioba, Anales AFA, **3**, 447-451. (1991)
5. Crank J., "Free and moving Boundary Problems", Clarendon Press, Oxford (1984)
6. T.R. Goodman, Transf. of the ASME, **80** (1958), 335-342.
7. J.C. Reginato, D.A. Tarzia. Int. J. of Engineering Science (1992) (A aparecer)
8. Reginato, J.C., Tarzia D.A., Dzioba, M.A., Plant and Soil (1992) (En revisión)
9. Tarzia D.A. - "A bibliography on moving-free boundary problems for the heat-diffusion equation. The Stefan problem", Prog. Naz. M.P.I. "Eq. di Evol. e applic. fisica-matematiche", Firenze, 1988.
10. J.H. Cushmann, Soil Science Society of America J., **46** (4), 704-709. (1982)