Aplicación del modelo MELEF-5v de simulación de flujo y transporte
de contaminantes de origen agrícola a través de la zona no saturada
Investigación en Zona No Saturada, pp: 135 - 156
Ed. I. Morell. 1994

APLICACION DEL MODELO MELEF-5V DE SIMULACION DE FLUJO Y TRANSPORTE DE CONTAMINANTES DE ORIGEN AGRÍCOLA A TRAVES DE LA ZONA NO SATURADA

Juan Marcos ALBERTO[1], Francisco PADILLA[2] e Ignacio MORELL[1]

[1] *Grupo de Investigación en Medio Ambiente y Recursos Naturales. Departamento Ciencias Experimentales Universitat Jaume I. Apt 224. 12080 Castellón.*
[2] *INRS-Eau. Universidad de Quebec. C.P. 7500 Sainte-Foy, Québec, Canadá. G1V 4C7.*

RESUMEN

El presente trabajo pretende verificar la aplicabilidad de un modelo matemático para simular la migración y transformaciones de las especies nitrogenadas a través de la zona no saturada. El modelo utilizado, Melef-5v, estudia el flujo del agua y el transporte del nitrógeno en el suelo en una sola dimensión. Asimismo se ha confecionado un modelo de absorción radicular de agua. Se ha realizado una aplicación del modelo en una parcela experimental situada en Saint Augustin (Quebec, Canadá). El cultivo implantado era maíz. Se utilizaron cápsulas cerámicas de succión para la obtención de agua intersticial. Se realizaron dos fertilizaciones durante el periodo de simulación: una con fosfato amónico y otra con nitrato amónico.

Los resultados obtenidos han demostrado una buena concordancia entre las concentraciones medidas y simuladas. Se ha constatado una rápida disminución de los contenidos de $N\text{-}NH_4^+$ en los primeros decímetros del suelo, mientras que la influencia de las fertilizaciones queda patente en la evolución de las concentraciones de $N\text{-}NO_3^-$. Asimismo, se observa una disminución de las mismas con la profundidad, debido a que en los horizontes superficiales se dan con mayor intensidad los procesos de transformación que afectan a las especies nitrogenadas.

ABSTRACT

The aim of this work is the verification of the applicability of a mathemathical model for simulation of nitrogen species migration and transformation through unsaturated zone. The model used, Melef-5v, studies water flow and nitrogen transport through the soil in one dimension. A water uptake model has been designed. One application in an experimental site for corn production in Saint Augustin (Quebec, Canada) has been carried out. Interstitial water samples were obtained by suction lysimeters. Two fertilizations, with ammonium phosphate and ammonium nitrate, were applied durig the simulation period.

Good agreement with simulated and observed measures has been achieved. Rapid disminution of $N\text{-}NH_4^+$ concentrations in the first decimeters of the soil and fertilizations influence on $N\text{-}NO_3^-$ concentration evolution have been observed. Besides $N\text{-}NO_3^-$ concentration decrease with depth, probably due to the intensification of nitrogen species transformations processes in soil superficial beds.

INTRODUCCIÓN

La aplicación abusiva de compuestos químicos nitrogenados como fertilizantes en agricultura representa un peligro potencial para el medio ambiente, ya que es la causa principal del aumento de las concentraciones

de nitrato en las aguas subterráneas. Recientemente, el desarrollo de modelos matemáticos ha permitido una mejor comprensión de los mecanismos que rigen el transporte y las transformaciones de las especies nitrogenadas en el suelo. El presente estudio tiene como finalidad principal verificar la aplicabilidad de un modelo matemático en una parcela experimental situada en St-Augustin, en Quebec (Canadá).

El modelo utilizado, "Melef-5v", estudia el flujo del agua, la temperatura y el transporte del nitrógeno en el suelo. Se trata de un modelo de investigación que utiliza el método de elementos finitos para la resolución de las distintas ecuaciones diferenciales que se tienen en cuenta. Se ha realizado una aplicación del modelo para estudiar la evolución de las concentraciones de N-NH_4^+ y N-NO_3^- a lo largo de un perfil de suelo, durante los meses de Junio hasta Octubre de 1990, en dicha parcela experimental de St-Augustin (Alberto, 1993).

DESCRIPCIÓN DEL MODELO MATEMÁTICO

Melef-5v es un modelo numérico, de tipo determinista, desarrollado para simular el flujo del agua, la variación de temperatura y el transporte de masa, así como las transformaciones del nitrógeno a través de la zonas saturada y no saturada del suelo en una dimensión (Padilla et al., 1992).

La solución de las ecuaciones principales que se plantean en el modelo, y en las que se basa su funcionamiento, se resuelven por el método de elementos finitos.

Los principales procesos del nitrógeno en el suelo considerados por el modelo son: nitrificación, desnitrificación, inmovilización y mineralización entre las especies del nitrógeno (NH_4^+ y NO_3^-) y el N-orgánico y la adsorción en las partículas del suelo del componente del agua NH_4^+-N.

Este modelo de transformación de las especies nitrogenadas tiene varios puntos de convergencia con otros modelos similares (Cabon et al., 1991; Johnsson et al., 1987; Kaluarachchi y Parker, 1988). De todas formas, los coeficientes de reacción de primer orden de los procesos biológicos principales se han corregido para el contenido de agua en el suelo y la temperatura. La adsorción-desorción del amonio se define en el equilibrio por una isoterma de tipo lineal de Freunlich.

La predicción del efecto de la temperatura en la cinética de las transformaciones de las especies nitrogenadas existentes en el suelo viene regida por la ecuación de Arrhenius.

Éstas y otras leyes físico-químicas son las que utiliza el modelo para enlazar temperatura, presión del agua y componentes del agua, con el fin de obtener soluciones numéricas transitorias de las ecuaciones diferenciales por las que se rigen estos procesos.

El modelo "Melef-5v" considera una serie de parámetros y variables que están estrechamente relacionados con las transformaciones y transporte de las especies nitrogenadas (NH_4^+ y NO_3^-) en el suelo. Dichos parámetros y variables, se pueden expresar en una serie de ecuaciones que rigen el flujo de agua, de calor y el transporte de las especies nitrogenadas. La ecuación

para representar el flujo transitorio del agua en un suelo parcialmente saturado en una sola dimensión, utilizada en Melef-5v, aparece descrita en Padilla y Villeneuve (1992). La ecuación para el transporte no estacionario del calor en un medio poroso parcialmente saturado está escrita, para una dimensión, por Menot (1979). Finalmente, la convección y dispersión del amonio (NH_4^+) y del nitrato (NO_3^-) en un suelo parcialmente saturado se ha expresado en una dimensión según las ecuaciones descritas por Kaluarachchi y Parker (1988) y Padilla y Villeneuve (1992). La variación de las cantidades de N-orgánico que afectan a la producción de NH_4^+-N se ha considerado que se basan en la ecuación enunciada por Padilla et al. (1992).

Todos los parámetros del suelo, necesarios para la resolución de las ecuaciones citadas anteriormente, pueden ser determinados experimentalmente sin excepción (Klute, 1986). Sin embargo, la obtención de alguno de estos parámetros en el laboratorio o en el campo puede ser bastante engorrosa, por lo cual, en ocasiones resulta más conveniente estimar tales parámetros de datos de otros suelos semejantes.

Modelo de absorción radicular

El programa Melef-5v no dispone en la actualidad de ningún tratamiento para la consideración de la absorción radicular del agua del suelo. Así pues, se ha confeccionado un modelo que se basa, principalmente, en la evolución del crecimiento radicular, la cobertura vegetal del suelo y la densidad radicular.

Para el cálculo de la evolución de la longitud de raíces en profundidad se ha utilizado la expresión empírica (Whitmore et al.,1991) :

$$l = \left(L^{-(1/n)} + e^{-k \cdot x}\right)^{-n}$$

donde l es la profundidad de las raíces (cm.), L es la profundidad máxima de las raíces (cm.), n corresponde a un factor de forma (1,5 para los procesos considerados), k es una constante de proporcionalidad (días·grado)$^{-1}$ y x es la temperatura media diaria acumulada por encima de 0°C a 20 cm. de profundidad en el suelo.

El cálculo de la cobertura vegetal se ha estimado en relación con el crecimiento de las raíces, según la expresión:

$$\frac{Sc}{Sc_{max}} = \frac{l}{L}$$

siendo l la profundidad de las raíces, L la profundidad máxima de las raíces, Sc_{max} es cobertura vegetal máxima del suelo y Sc es la cobertura vegetal del suelo.

El mismo tipo de relación lineal la hemos utilizado para el cálculo de la densidad radicular:

$$\frac{W}{W_{max}} = \frac{1}{L}$$

donde W es la densidad radicular y W_{max} corresponde a la densidad máxima de raíces.

La absorción del agua en el suelo por parte de las raíces de los vegetales se considera función de la evapotranspiración, de la distribución de las raíces en el suelo y de la humedad o sequedad de la zona radicular (Huwe and Van der Ploeg, 1991).

La evapotranspiración se ha calculado por el método de Penman, modificado por Monteith. A la ETP se le aplica una función correctora b dependiente del contenido de agua en el suelo. Normalmente se asume que es una función lineal y se usa para convertir la evapotranspiración potencial a evapotranspiración real (Crago & Brutsaert, 1992). Dicha función b tiene la siguiente expresión:

$b = 0{,}0795\,(q-21{,}7)+0{,}920 \qquad q < 21{,}7\ \%$

$b = 0{,}920 \qquad q > 21{,}7\ \%$

Donde q es el contenido de agua en el suelo.

De la ETR obtenemos el valor de la transpiración T de la forma siguiente (Huwe and Van der Ploeg,1991):

$$T = ETR - E$$

El término E representa la evaporación en superficie, la cual está relacionada con la cobertura vegetal Sc a través de la expresión (Huwe & Van der Ploeg,1991):

$$E = (1-Sc)\ ETR$$

Una vez calculada la transpiración, se calcula el grado de absorción potencial del agua por parte de las plantas Up a una profundidad dada de la manera siguiente (Huwe & Van der Ploeg,1991):

$$Up = \frac{W}{\int_0^L W dz} T$$

En esta ecuación, Up es la absorción radicular de agua, W=W(z,t) es la densidad longitudinal de raíces a una profundidad dada y en un tiempo dado, L es la longitud máxima de las raíces y T es la transpiración. La obtención de la absorción real, U, se calcula de acuerdo con:

$$U = f_1 \cdot Up$$

f_1 es un factor de reducción, el cual depende de la presión del agua en el suelo, h, a la profundidad z. Este factor varía con el lugar y el tipo de cultivo.

DESCRIPCIÓN DE LA PARCELA EXPERIMENTAL

La parcela experimental de 52x18 m está situada en el municipio de Saint Augustin de Desmaures (Quebec, Canadá).

El suelo de la parcela experimental, de textura bastante homogénea, tiene una textura de franco arenosa a gravosa. Un análisis granulométrico ha demostrado los siguientes porcentajes en tamaño de grano.

PROPIEDADES	PROFUNDIDAD		
	0-0,35 m.	0,35-0,75 m.	0,75-1,15 m.
% ARENA	51,1	53,0	64,7
% LIMO	23,7	25,1	19,1
% ARCILLA	21,2	18,9	14,2
% MAT. ORG.	3,97	2,93	1,98

Tabla 1. *Características texturales de la parcela experimental (Jobidon, 1990)*

El cultivo implantado en esta parcela era maíz azucarado. Recibió una fertilización de 133 kg/ha de nitrógeno inorgánico dividido en dos aplicaciones: una de 40 kg N/ha de fosfato amónico y otra aplicación de 93 kg N/ha de nitrato amónico.

La técnica de muestreo del agua intersticial se ha basado en la utilización de cápsulas de succión de porcelana porosa. En la parcela experimental se encuentran instaladas 32 cápsulas de succión y 8 lisímetros sin tensión o colectores. Las primeras son utilizadas para el muestreo de agua intersticial, y los lisímetros se instalaron con el fin de registrar los volúmenes de agua que percolan a través de la zona no saturada. Se llevaron a cabo un total de 20 campañas de toma de muestra. La primera fue a continuación de la primera aplicación del fertilizante, y la última se realizó a finales del otoño. A lo largo del verano se tomarón muestras cada semana, excepto en las semanas que siguieron a la fertilización de mayo, en las cuales, para seguir el posible descenso de una fuerte concentración de nitrógeno, se efectuaron dos veces por semana. La segunda fertilización, al realizarse en periodos secos, se consideró que no hubo necesidad de aumentar la frecuencia del muestreo. A partir del 28 de agosto, la recolección de las muestras fue quincenal, y se terminó con el muestreo el 6 de noviembre, con la llegada de las primeras nieves (Trépanier, 1992).

APLICACIÓN DEL MODELO

En este apartado se hace una descripción del medio físico que se ha tenido en cuenta a la hora de la simulación, se exponen los valores de los parámetros utilizados, se hace un resumen de la discretización empleada y se definen las condiciones que se han impuesto al programa.

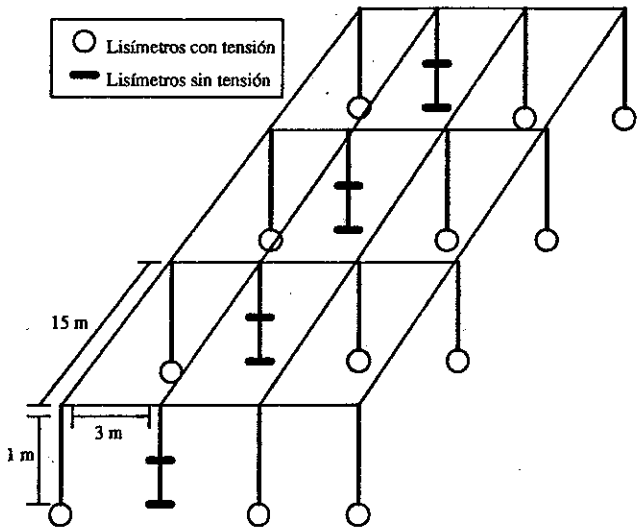

Figura 1. Esquema de la parcela experimental.

Descripción del medio físico

El medio que se ha modelado corresponde a una columna de suelo de 7,5 m. de profundidad y una área asociada de (52x18) m^2, cuyo límite superior coincide con la superficie del terreno y el límite inferior se encuentra en la zona saturada. El nivel freático se sitúa, para el comienzo de la simulación, a 2,5 m. de profundidad.

En base a la granulometría y a la conductividad hidráulica saturada, se ha optado por dividir la columna en tres intervalos: de 0 a 0,35 m., de 0,35 a 0,75 m. y de 0,75 a 2,5 m.. Las características físicas se muestran en la tabla 2:

PROPIEDADES	PROFUNDIDAD		
	0-0,35 m.	0,35-0,75 m.	0,75-2,5 m.
Perm. intrínseca (m^2)	3,3E-14	6,3E-14	7,7E-14
Cond. térmica ($W \cdot m^{-1} \cdot °K^{-1}$)	2,5	3,0	3,3
Calor específico ($J \cdot kg^{-1} \cdot °K^{-1}$)	700	700	700
Disper. longitudinal (m)	0,05	0,05	0,05
Coef. dif. mol. NH_4^+ ($m^2 \cdot s^{-1}$)	1,5E-9	1,5E-9	1,5E-9
Coef. dif. mol NO_3^- ($m^2 \cdot s^{-1}$)	2,0E-9	2,0E-9	2,0E-9
Índ. distrib. tam. poros (a)	55,3	72,0	69,6
Altura capilar (Pa)	-0,5E4	-0,3E4	-0,2E4
Saturación irreductible	0,24	0,17	0,13
Dens. de sólidos ($kg \cdot m^{-3}$)	2,6E3	2,5E3	2,6E3
Porosidad	0,45	0,46	0,44

Tabla 2. *Características físicas del medio aplicadas a la simulación.*

Los valores de la conductividad térmica y del calor específico de los sólidos se ha obtenido a partir de los valores expuestos por Groot y Verberne (1991). Los valores de los coeficientes de difusión molecular de NO_3^- y NH_4^+ se han extraído Kersebaum y Richter (1991). El coeficiente de dispersión longitudinal se ha ajustado en la calibración del modelo. Los contenidos de materia orgánica en el suelo se han obtenido a partir de los valores calculados por Lafrance et al. (en prensa) (tabla 3).

Los valores que figuran a partir de 1 m. de profundidad se han obtenido a partir de una regresión exponencial acomodada a los valores medidos más superficiales.

De acuerdo con la dependencia de las cinéticas de primer orden con la temperatura, expresada según la ecuación de Arrhenius, los valores de las energías de activación (E_a) y las correspondientes constantes (A) para los procesos biológicos principales que contempla el modelo, se han elegido, en base a bibliografía.

PROFUNDIDAD (m)	CONTENIDO DE M.O. (kg N/kg suelo)
0,00-0,20	2,0E-3
0,20-0,40	1,4E-3
0,40-0,60	1,2E-3
0,60-0,80	3,4E-4
0,80-1,00	1,6E-4
1,00-1,20	1,2E-4
1,20-1,40	5,9E-5
1,40-1,60	3,1E-5
1,60-1,70	1,7E-5

Tabla 3. *Contenido en nitrógeno orgánico del suelo.*

PROCESOS	$E_a (J \cdot mol^{-1})$	K (h^{-1})	A
NITRIFICACIÓN	59.406	K_1:0,1	10,7E5
INMOV. N-NH_4^+	19.728	K_2:0,006	5,7E-3
MINERALIZACIÓN	47.046	K_3:3,3E-6	0,21
INMOV. N-NO_3^-	190113	K_4:0,0009	6,4E-4
DESNITRIFICACIÓN	55.000	K_5:0,002	3.474

Tabla 4. *Coeficientes de la ecuación de Arrhenius para los procesos biológicos*

Los valores de las energías de activación provienen de las siguientes fuentes:

- E_a para la nitrificación: Addiscott, 1983.
- E_a para la inmovilización del N-NH_4^+:Campbell et al., 1981.
- E_a para la mineralización: Mac Duff y White, 1985.
- E_a para la inmovilización del N-NO_3^-: Stanford et al., 1973.
- E_a para la desnitrificación: Mangaraja y Misra, 1978.

Los valores de las constantes de reacción de los procesos biológicos, a 20 °C aproximadamente, se han obtenido de:

- K_1: Mishra y Misra, 1991.
- K_2: Kaluarachchi y Parker, 1988.

- K_4: Cabon et al., 1991.
- K_5: Misra et al., 1974a, 1974b.
- K_3: se ha deducido a partir de la ecuación que expresa el balance del N-orgánico en el suelo

Respecto al valor del coeficiente de partición para la adsorción del $N\text{-}NH_4^+$ a las partículas y materia orgánica del suelo, se obtuvo en base a los datos provenientes del análisis del $N\text{-}NH_4^+$ en el agua intersticial del suelo y en el suelo (Chapdelaine, 1992). Según ésto, se obtuvo un K_d del orden de 10E-3 m^3/kg.

Haciendo referencia a los parámetros que definen el efecto del contenido de agua en el suelo en los principales procesos biológicos que afectan a las especies nitrogenadas, se han tomado de diferentes autores (Hansen et al., 1991; Johansen, 1975). Así pues, el valor elegido que rigen la función que representa la influencia del contenido de agua para la nitrificación e inmovilización del $N\text{-}NO_3^-$ a saturación es 0, y para la mineralización 0.6. Respecto a los límites del intervalo de humedad que controlan la mineralización, inmovilización del $N\text{-}NH_4^+$, nitrificación e inmovilización del $N\text{-}NO_3^-$ en el suelo se han tomado los valores de 0.4 y 0.25. El umbral de contenido de agua a partir del cual la respuesta de la función que rige la desnitrificación se incrementa hacia el valor máximo es 0.38.

Discretización

La discretización espacial del problema se resolvió mediante una malla de elementos finitos unidimensional, donde cada elemento tiene asociado tres nudos. La densidad de nudos es distinta a lo largo del perfil:

- entre 0 y 2 m. se han considerado elementos de espesor 0,10 m. (espesor internodal de 0,05 m.)
- entre 2 y 2,5 m. se han considerado elementos de 0,5 m. (espesor internodal de 0,25 m.)
- entre 2,5 y 7,5 m. de profundidad los elementos son de 5 m. (separación internodal de 2,5 m)

Respecto a la discretización temporal, la simulación abarca un periodo de 156 días (del 29 de Mayo al 31 de Octubre de 1990). Este periodo se ha dividido en 10 periodos de 15 y 16 días y un primer periodo de 18 días al comienzo de la simulación. Esta división del tiempo se ha efectuado para tratar las entradas y salidas del sistema, por la precipitación y la evapotranspiración respectivamente, del agua.

Respecto a la discretización utilizada para el cálculo de las ecuaciones consideradas por parte del modelo, los 10 periodos resultantes de la discretización anterior se han discretizado en intervalos de 2 días (los periodos de 16 días) o de 3 días (periodos de 15 y 18 días), imponiendo, al modelo, un tiempo máximo de cálculo de un día.

Esta discretización se ha definido según esta configuración con el fin de obtener una mayor estabilidad numérica en la solución y minimizar el tiempo de cálculo.

Condiciones de simulación

Con la aplicación del modelo se pretende obtener soluciones numéricas transitorias partiendo de un estado inicial estacionario en el suelo. Consecuentemente, se parte de unas condiciones iniciales de flujo nulo con un potencial constante de -2,5m.

Las condiciones temporales impuestas al modelo con respecto al flujo del agua en el suelo se pueden resumir en dos tipos de condiciones en los límites. En la base del dominio discretizado (-7,5 m.) se ha considerado una condición de Dirichlet con un potencial constante para todo el periodo de simulación (156 días). En cambio, en el límite superior de la malla se ha considerado una condición de Neuman con un caudal de entrada constante para cada periodo de tiempo (tabla 5).

Se consideran caudales negativos, a aquellos caudales que se infiltran en el terreno.

Con respecto al transporte de calor, se parte de unas temperaturas iniciales del suelo, a lo largo del perfil. En la base de la malla se asume una condición de Dirichlet, fijando un valor constante, para todo el periodo de simulación, de 7,8 °C. En el límite superior de la discretización espacial se ha aplicado otra condición de Dirichlet, pero esta vez, para cada uno de los 10 intervalos en que se ha dividido el periodo de simulación. Los valores de temperatura considerados en el límite superior se pueden apreciar en la tabla 5.

PERIODOS (días)	CAUDALES ENTRADA ($kg/m^2 s$)	TEMP. LÍM. SUP. (°C)
1-18	-0,9E-5	14,4
19-33	-1,8E-5	17,1
34-48	2,7E-5	17,3
49-64	-1,9E-5	21,2
65-79	-4,7E-5	20,1
80-95	-1,6E-5	18,4
96-110	-1,1E-5	14,4
111-125	-7,2E-5	10,8
126-140	-7,8E-5	10,1
141-156	-3,0E-5	5,1

Tabla 5. *Caudales de entrada al sistema y temperaturas en el límite superior para los periodos de tiempo considerados.*

Respecto al transporte de las especies nitrogenadas ($N\text{-}NO_3^-$ y $N\text{-}NH_4^+$) en el dominio discretizado, las condiciones iniciales corresponden a las concentraciones medidas en el terreno al principio del periodo que se va a simular.

La concentración inicial de N-org en el suelo se ha tomado en base a los valores obtenidos por Lafrance et al. (en prensa) y se indican en la tabla 3.

El modelo de transporte de $N\text{-}NO_3^-$ y $N\text{-}NH_4^+$ tiene una condición no lineal de Cauchy definida en el límite superior después de las fertilizaciones. Las fertilizaciones efectuadas son las siguientes:

29 de Mayo	40,0 kg N/ha de $PO_4(NH_4)_3$.
26 de Julio	93,5 kg N/ha de $NO_3(NH_4)$.

Según estas fertilizaciones, se obtienen las siguientes entradas de nitrógeno, en forma de masa de nitrógeno por superficie para el periodo de tiempo en el que se ha efectuado la fertilización:

$[N\text{-}NH_4^+]$	$[N\text{-}NO_3^-]$	
2,6E-6	0,0E-0	Periodo primero (días del 1 al 18)
6,7E-6	6,7E-6	Periodo cuarto (días del 49 al 64)

Las concentraciones de $N\text{-}NH_4^+$ y $N\text{-}NO_3^-$ vienen expresadas en gr/m^2 s.

Para el resto de los periodos de la simulación no se ha considerado ninguna aportación externa de nitrógeno al sistema, así pues, no se ha tenido en cuenta una posible concentración de nitrógeno en el agua de lluviá.

Para ambas especies nitrogenadas, el modelo asume una condición de Neuman cero estacionaria a la profundidad de 7,5 metros.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Debe tenerse en cuenta que el objetivo principal del presente trabajo es evaluar la capacidad de un modelo para prevenir la evolución de concentraciones de algunas especies nitrogenadas (nitrato y amonio) en un perfil de suelo en condiciones específicas. Para hacer esto, los trabajos llevados a cabo han consistido en la realización de una aplicación tipo gestión (varios parámetros han sido obtenidos de la literatura) del modelo matemático de simulación de flujo y transporte "Melef-5v".

Consecuentemente, al tratarse de una aplicación del modelo, y no de una validación (donde la totalidad de los parámetros de entrada deben conocerse con exactitud), las posibles variaciones encontradas entre los valores medidos y simulados no pueden ser imputadas al modelo, sino que más bien, pueden ser debidas a la escasa validez de algunos parámetros considerados en la aplicación, como por ejemplo la evapotranspiración, para cuyo valor el modelo ha demostrado una gran sensibilidad en el momento de la calibración.

Solución para el modelo de cálculo de la absorción radicular

La profundidad máxima de las raíces que se ha considerado es de 170 cm (Jones el al., 1991). La constante de proporcionalidad (días-grado)$^{-1}$ para el maíz es de 3,6E-3 (días °C)$^{-1}$. Se ha considerado una cobertura vegetal

máxima de 70 % y una densidad máxima de raíces deacuerdo con los valores expuestos por Jones et al., 1991. así pues, la distribución radicular del agua a lo largo del periodo vegetativo del maíz azucarado es la que se expone en la tabla 6.

Se observa que los resultados representan bastante bien las condiciones reales de absorción de agua por parte de las raíces de las plantas, ya que sigue las pautas típicas de la absorción del agua en el suelo por parte de las raíces. Así, se aprecia un máximo de absorción en los horizontes superficiales y un mínimo al final de la zona radicular. La evolución temporal de la absorción indica que hay un máximo en el mes de Agosto, coincidiendo con el periodo de madurez del cultivo y con temperaturas elevadas, que es justo cuando la planta necesita mayor aporte de agua y se da la máxima transpiración. En conclusión, el periodo de mayor absorción se da en la época de temperaturas elevadas y en el periodo de maduración del maíz.

Concentraciones de $N\text{-}NH_4^+$

En la figura 2 se pueden observar las concentraciones medianas de $N\text{-}NH_4^+$ (ppm), señaladas por puntos negros, a lo largo del periodo de tiempo simulado y los valores resultantes de la simulación para este mismo periodo, señalados por una línea.

PROF	DÍAS								
(cm)	1-18	19-33	34-48	49-64	65-79	80-95	96-110	111-125	126-140
0	2,1E-6	6,6E-6	2,3E-5	3,8E-5	4,3E-5	4,8E-5	9,8E-6	9,0E-6	7,5E-6
10		5,9E-6	2,1E-5	3,5E-5	4,0E-5	4,2E-5	9,2E-6	7,4E-6	6,8E-6
20		5,2E-6	1,8E-5	3,1E-5	3,3E-5	3,9E-5	7,9E-6	6,8E-6	6,0E-6
30			1,5E-5	2,5E-5	3,0E-5	3,1E-5	6,6E-6	5,6E-6	4,9E-6
40			1,4E-5	2,4E-5	2,9E-5	3,0E-5	6,5E-6	5,5E-6	4,7E-6
50				2,3E-5	2,8E-5	2,8E-5	6,2E-6	5,4E-6	4,5E-6
60				2,2E-5	2,6E-5	2,7E-5	5,7E-6	5,1E-6	4,3E-6
70				1,9E-5	2,3E-5	2,3E-5	5,2E-6	4,5E-6	3,7E-6
80				1,7E-5	2,0E-5	2,1E-5	4,6E-6	4,0E-6	3,3E-6
90					1,7E-5	1,8E-5	3,9E-6	3,4E-6	2,8E-6
100					1,5E-5	1,4E-5	3,1E-6	2,6E-6	2,2E-6
110					1,1E-5	1,0E-5	2,3E-6	2,0E-6	1,7E-6
120					6,7E-6	7,2E-6	1,5E-6	1,3E-6	1,1E-6
130					6,4E-6	6,5E-6	1,4E-6	1,2E-6	1,0E-6
140						5,9E-6	1,2E-6	1,1E-6	9,2E-7
150						4,6E-6	1,0E-6	9,0E-7	7,5E-7
160							7,9E-7	6,8E-7	5,7E-7
170									1,8E-7

Tabla 6. *Distribución de la absorción radicular del agua a lo largo del periodo vegetativo del maíz azucarado ($kg/m^3 \cdot s$).*

Se observa una sobreestimación general para las profundidades de 50 y 100 cm (fig. 2.A y 2.B, respectivamente), debido, posiblemente, a una infravaloración de la nitrificación en los horizontes superficiales, así como a la no consideración de una absorción preferencial de $N\text{-}NH_4^+$ por parte de las raíces de las plantas respecto al $N\text{-}NO_3^-$ (Wang, X. y Below, F.E., 1992) Otra posible causa de este desajuste puede ser debida a la consideración del valor

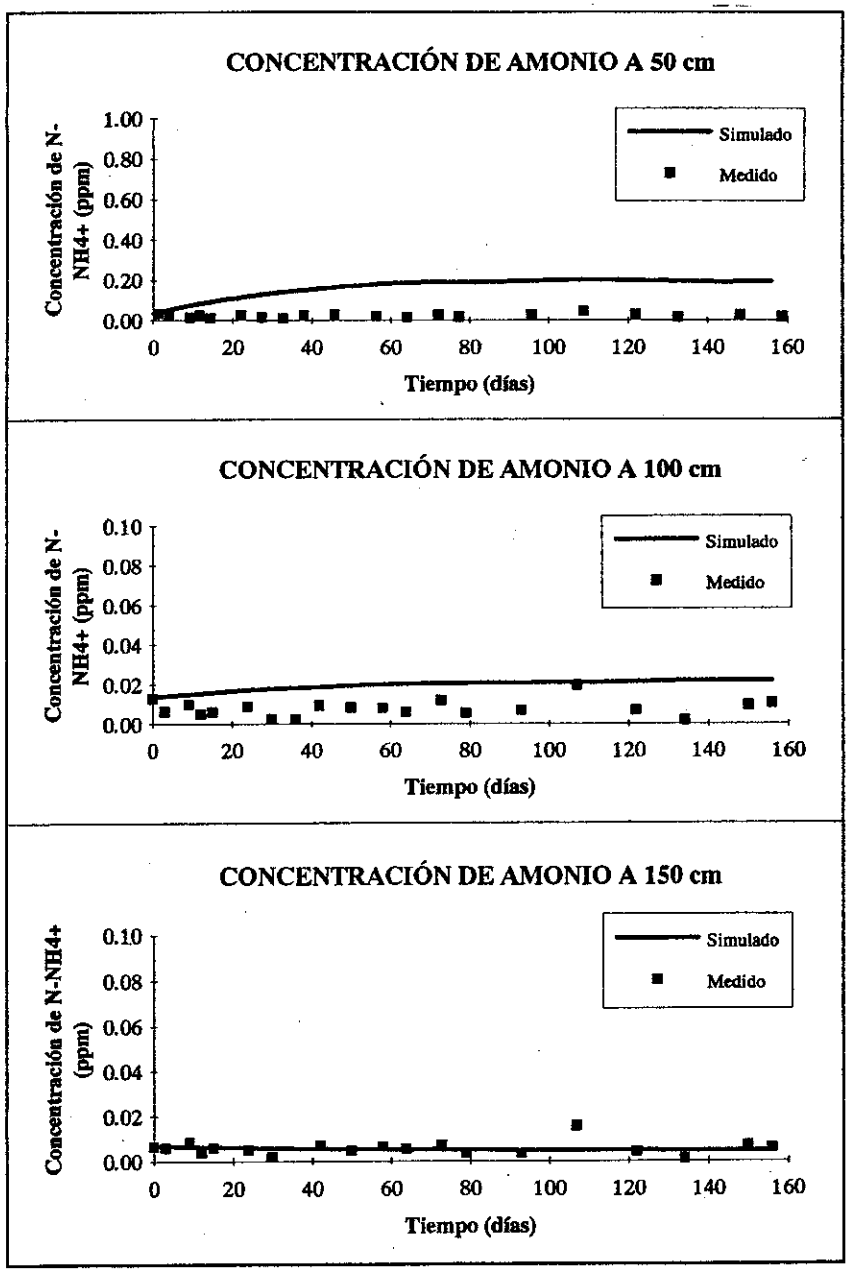

Figura 2. *Comparación de los valores experimentales con los valores simulados de N-NH_4^+: A) 50 cm de profundidad; B) 100 cm de profundidad; C) 150 cm de profundidad.*

de k_d (coeficiente de adsorción a los minerales de la arcilla) bajo para los horizontes superficiales.

De todas formas, la tendencia general de estabilidad en las concentraciones sí queda patente, tanto en los datos medidos como en los simulados.

El ajuste a 150 cm de profundidad (fig. 2.C) es bastante bueno, correspondiendo este nivel a una zona en la que prácticamente no hay absorción de N-NH_4^+ por parte de las raíces de las plantas y además, el NH_4^+ ya ha tenido suficiente tiempo para nitrificarse, lo que repercute en una disminución apreciable de su concentración.

Cabe resaltar que la influencia de las fertilizaciones no se ven reflejadas en los valores medidos ni en los simulados, lo cual apoya, todavía más, la hipótesis de una masiva nitrificación, adsorción y fijación a los minerales de la arcilla y absorción del N-NH_4^+ en los primeros niveles del perfil.

De todas formas, hay que mencionar que los valores de N-NH_4^+ son muy pequeños, muchos de ellos moviéndose en el límite de detección del método analítico, con lo cual los errores de análisis pueden ser mucho más significativos y la variabilidad espacial de los resultados también es mucho mayor.

En general, podemos concluir diciendo que se observa una tendencia general a la disminución con la profundidad de los valores simulados, acorde con los valores medidos y una estabilidad a lo largo del tiempo.

Concentraciones de N-NO_3^-

La concordancia entre las concentraciones simuladas y observadas respecto al N-NO_3^- es bastante buena a lo largo de todo el periodo de simulación y para las distintas profundidades (figura 3).

Se puede apreciar que el ajuste de las concentraciones medidas y simuladas en función de la profundidad es muy alto, reflejando una disminución de concentraciones en función de la profundidad, al igual que los valores observados.

Respecto a las concentraciones máximas, la modelización las refleja con bastante exactitud, aunque a la profundidad de un metro, el máximo simulado se alcanza con anterioridad al observado, posiblemente debido a una sobrevaloración en el ajuste del régimen de flujo impuesto al modelo. A 150 cm de profundidad, el modelo subestima ligeramente dicho máximo, pero la tendencia al aumento de concentración se da el mismo día (día 135).

Refiriéndonos finalmente a la evolución de las concentraciones a lo largo del tiempo para las distintas profundidades consideradas, resulta interesante remarcar una buena concordancia en la evolución de las concentraciones a lo largo del periodo vegetativo.

Situándonos a 0,5 metros de profundidad (fig 3.A), se observa que hasta el mes de Agosto el modelo y los valores medidos reflejan una estabilidad de concentraciones, observándose un brusco ascenso a partir de primeros de Agosto. Este aumento brusco en las concentraciones medidas y simuladas

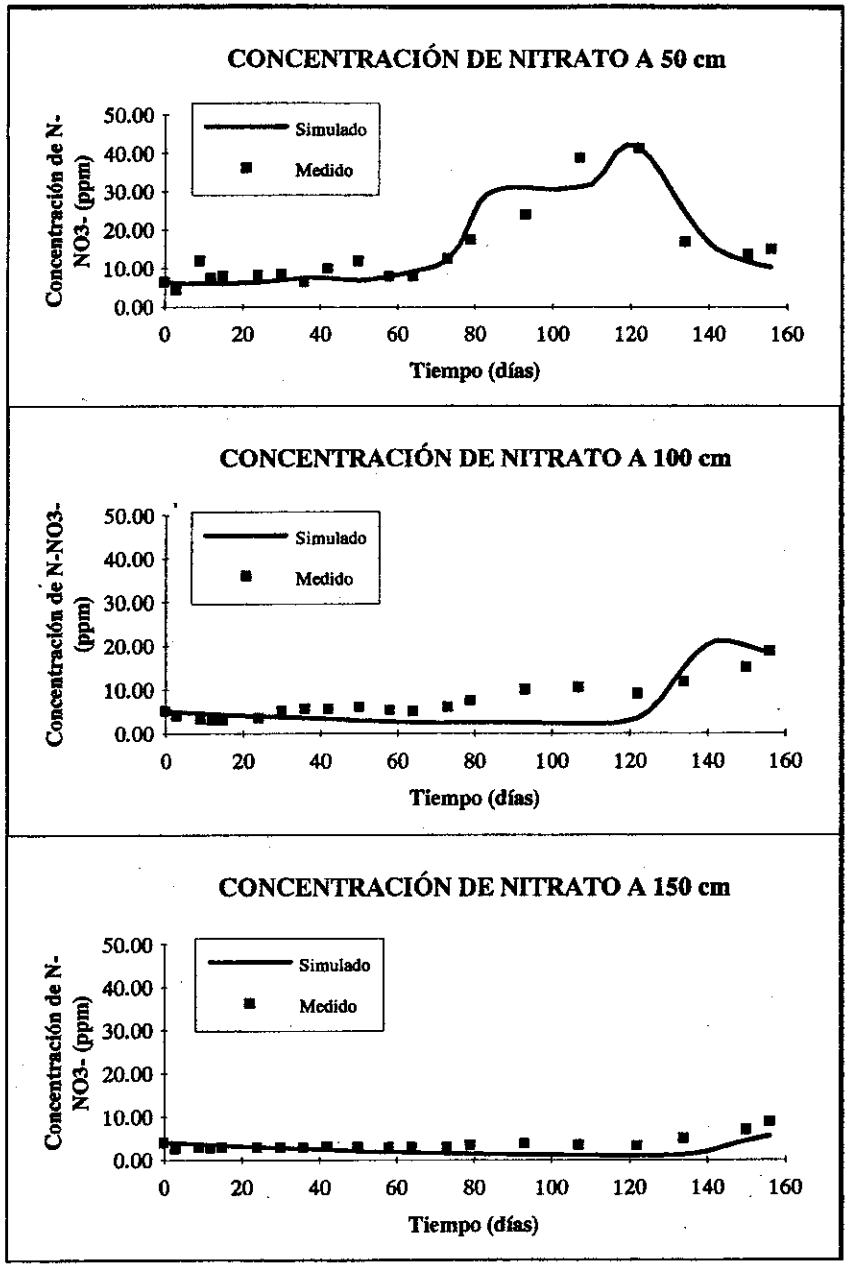

Figura 3. *Comparación de los valores experimentales con los valores simulados de N-NO_3^-: A) 50 cm de profundidad; B) 100 cm de profundidad; C) 150 cm de profundidad.*

puede ser debido al hecho de que existe una fertilización con NH_4NO_3 en el periodo inmediatamente anterior; el pequeño desfase que existe entre dicha fertilización y la llegada del frente viene marcado por un periodo de escasa lluvias, que implica escasa lixiviación de N-NO_3^-, así como el tiempo necesario para la llegada del N-NO_3^- que viene disuelto en el agua de infiltración.

En la curva obtenida en la simulación, se observa que a partir del día 80 y hasta el día 110 del periodo simulado, se da un estabilidad de las concentraciones. Este fenómeno puede deberse a que se trata de un periodo extremadamente seco, con respecto a los periodos restantes, y no se produce infiltración con lo que no hay una llegada de N-NO_3^- de niveles superiores. Este fenómeno parece no apreciarse en los datos medidos, aunque hay que mencionar que para este periodo hay una significativa ausencia de datos que puedan confirmar esta influencia de la ausencia de infiltración en la estabilidad de la concentración de N-NO_3^-. A partir del día 110 se experimenta un aumento de las concentraciones hasta el máximo, situado a 42 ppm de N-NO_3^- el día 268. Este aumento es debido al incremento de los caudales de entrada al registrarse una mayor precipitación que provoca el lixiviado de N-NO_3^-. A partir de esta última fecha se da una disminución en las concentraciones causada por la no llegada del frente de N-NO_3^- procedente de las fertilizaciones.

De acuerdo con la figura 3.B, donde se muestra la evolución de las concentraciones de N-NO_3^- simuladas y medidas a 100 cm, podemos remarcar que las concentraciones son mucho más bajas que a 50 cm de profundidad y que hay un cierto desfase entre los máximos, debido a que el N-NO_3^- llega a esta profundidad con posterioridad. Esta disminución en las concentraciones puede ser debida a que a medida que el frente de N-NO_3^- va descendiendo por el perfil, es absorbido por las raíces de las plantas, principalmente, y además se puede dar una cierta inmovilización del mismo por la materia orgánica presente en el suelo, así como procesos de desnitrificación.

Parece apreciarse la existencia de dos máximos, en los valores medidos, uno a 100 días, aproximadamente, y el segundo al final del periodo considerado. El primero, podría ser consecuencia del lixiviado del N-NO_3^- correspondiente al primer máximo observado, en la curva de simulación a 50 cm el día 80, y el segundo, consecuencia de la llegada del frente principal de N-NO_3^-, correspondiente al máximo principal de la curva a 50 cm. Así pues, se contemplan unos desfases entre máximos, a 50 y 100 cm de profundidad de unos 20 días.

Respecto a la fig 3.C, en la que se señalan las concentraciones, medidas y simuladas, a lo largo del tiempo considerado en la simulación a la profundidad de 150 cm, se observa una gran estabilidad con un ligero aumento al final del periodo, que podría representar la llegada del frente de N-NO_3^- procedente de la fertilización. En este caso no se observan ya dos máximos y el frente llega muy atenuado, debido a las mismas razones citadas en el comentario de la evolución de las concentraciones a 100 cm de profundidad.

Simulación de la evolución temporal de las concentraciones de $N\text{-}NH_4^+$

Las concentraciónes de $N\text{-}NH_4^+$ son muy bajas a lo largo del perfil. La figura 4 muestra que después del primer periodo de abonado, con $(NH_4)_2SO_4$, las concentraciones de $N\text{-}NH_4^+$ disminuyen rápidamente en los primeros centímetros del suelo. Este fenómeno puede ser debido a una rápida adsorción del $N\text{-}NH_4^+$ a la superficie de las partículas del suelo (minerales de la arcilla, fundamentalmente) así como a una acelerada nitrificación. Las concentraciones calculadas por el modelo al final del periodo de simulación son prácticamente inapreciables; por tanto, los contenidos de $N\text{-}NH_4^+$ son de escasa importancia desde el punto de vista de la posible contaminación del acuífero subyacente. ya que el $N\text{-}NH_4^+$ es una especie nitrogenada que experimenta una rápida disminución en el suelo debido a procesos de nitrificación y adsorción a las superficies de los minerales de la arcilla, principalmente, en los primeros centímetros del suelo. Otro factor que puede contribuir de manera decisiva a la reducción ded $N\text{-}NH_4^+$ en el suelo es la absorción de esta especie por parte de las raíces de las plantas.

Simulación de la evolución temporal de las concentraciones de $N\text{-}NO_3^-$

En la figura 5.A se muestran las concentraciones de $N\text{-}NO_3^-$ al principio de la simulación a lo largo del perfil considerado. Sobre los 10 cm de profundidad se observa una variación que es debida a oscilaciones del modelo producidas en la resolución de las ecuaciones.

En las figuras 5.B, C y D se puede apreciar la evolución de las concentraciones de $N\text{-}NO_3^-$ durante un periodo de fertilización con NH_4NO_3. La asimilación del abono impuesta al modelo transcurre desde el 15 hasta el 31 de Julio. Así pues, se aprecia un aumento en los valores de las concentraciones en la superficie ligado a la acumulación y entrada de fertilizante, así como un ligero desplazamiento del frente hacia zonas más profundas.

La figura 5.E refleja la concentración simulada 17 días después del final del periodo de abonado. Se observa un avance del frente de $N\text{-}NO_3^-$ a través del suelo. Se aprecia como el máximo, que al final del periodo de abonado se situaba en la superficie (fig 5.D) con valores de 410 ppm de $N\text{-}NO_3^-$, ahora se ha desplazado a 28 cm de profundidad ostentando valores de 95 ppm. En base a esta variación, se puede obtener un valor de velocidad de flujo medio de 1,14 E-4 m/min.

La disminución de la concentración puede ser debida principalmente, a la absorción de $N\text{-}NO_3^-$ por las raíces de las plantas, ya que en esta parte del periodo vegetativo (comienzo de la madurez) la planta necesita grandes cantidades de nitrógeno para sus procesos metabólicos.

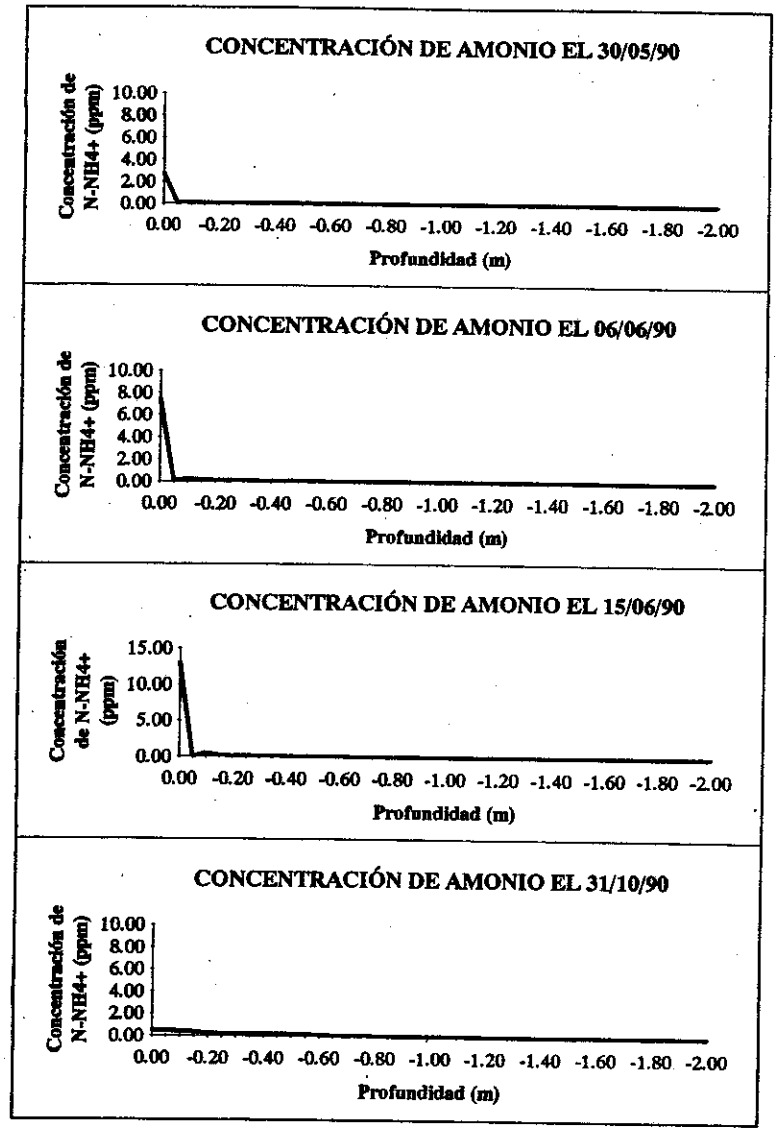

Figura 4. *Simulación de la evolución temporal de las concentraciónes de $N\text{-}NH_4^+$: A) 30/05/90; B) 06/06/90; C) 15/06/90; D) 31/10/90*

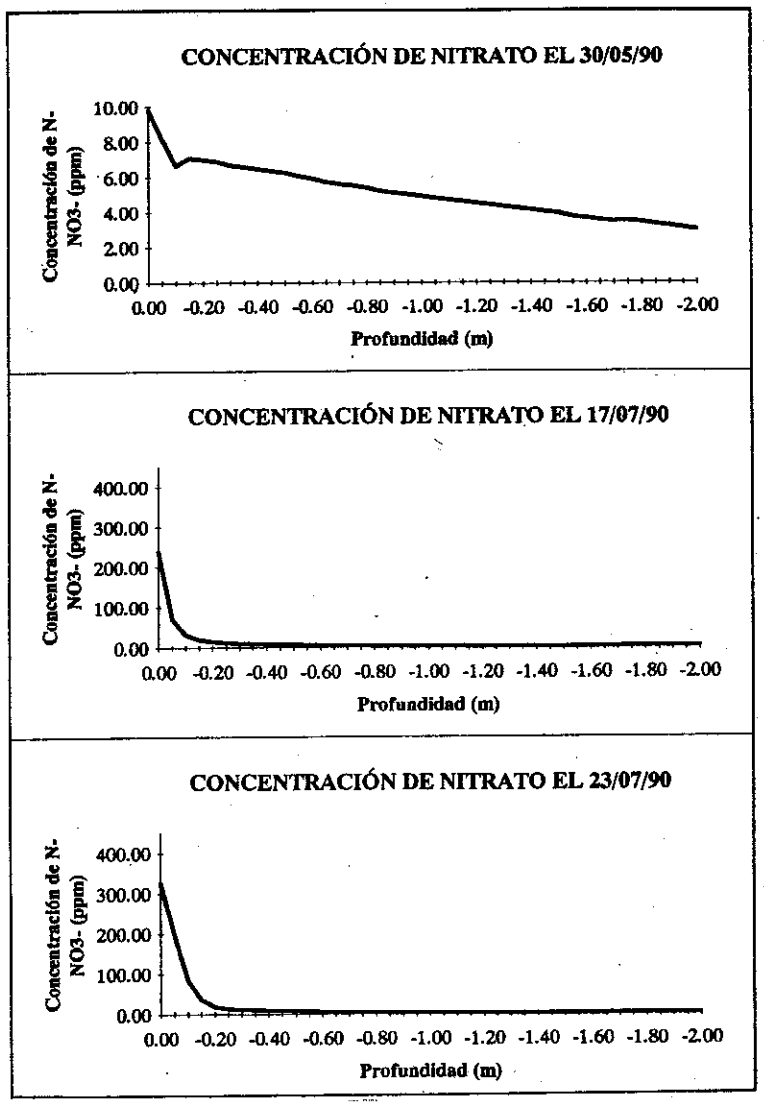

Figura 5. *Simulación de la evolución temporal de las concentraciónes de N-NO_3^-: .A) 30/05/90; B) 17/07/90; C) 23/07/90*

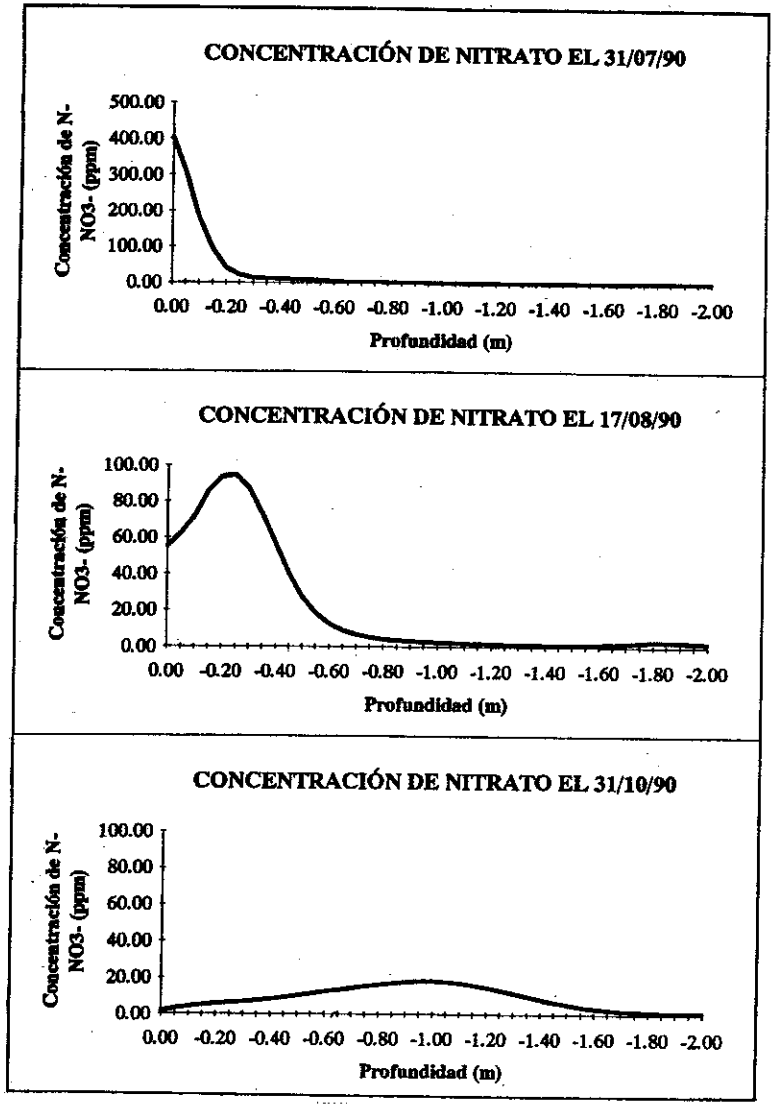

Figura 5 *(continuación). Simulación de la evolución temporal de las concentraciónes de N-NO_3^-: D) 31/07/90; E) 17/08/90; F) 31/10/90*

La figura 5.F corresponde a la variación de la concentración de $N\text{-}NO_3^-$ al final del periodo simulado. Se observa como el máximo está desplazado hacia horizontes más profundos (aproximadamente 1 metro) y una gran atenuación de las concentraciones. Esta disminución de las concentraciones puede ser debida a procesos de desnitrificación, absorción de las raíces e inmovilización de $N\text{-}NO_3^-$ convirtiéndolo en N-orgánico.

CONCLUSIONES

El peligro de contaminación de las aguas subterráneas por fertilizantes nitrogenados, inorgánicos y orgánicos, empleados en agricultura es un problema medio ambiental serio. Desafortunadamente, la complejidad de los procesos relativos a las transformaciones del nitrógeno y a su transporte a través de la zona no saturada no facilitan la gestión racional de su utilización. La modelización aparece, pues, como una herramienta interesante que permite establecer y conducir estrategias de protección del medio ambiente.

Se puede concluir que resolución en la simulación del comportamiento de las especies nitrogenadas en el suelo ha sido aceptable.

En los procesos de calibración ha quedado patente la gran sensibilidad del modelo para los procesos que afectan al flujo del agua: precipitación, ETR y dispersión hidroninámica, principalmente.

De la conclusión anterior se desprende que una adecuada dosificación hídrica contribuye a una disminución del efecto contaminante de las especies nitrogenadas en el suelo.

En vista de los resultados obtenidos, se observa que el poder contaminante directo del $N\text{-}NH_4^+$ sobre el acuífero es despreciable, pero indirectamente si puede contribuir al aumento de la concentración de $N\text{-}NO_3^-$ mediante el proceso de nitrificación.

Respecto a las concentraciones de nitrógeno nítrico se aprecia claramente la influencia de las fertilizaciones, así como una disminución en profundidad, sobretodo en el primer metro del perfil, que es donde se manifiestan de manera más acusada los procesos de transformación de las especies nitrogenadas.

Finalmente, a modo de resumen, se puede concluir que la aplicación del modelo "Melef-5v" ha permitido demostrar la importancia de tal herramienta para la comprensión y la gestión del devenir del nitrógeno en los suelos agrícolas.

AGRADECIMIENTOS

Especial agradecimiento al Institut National de la Recherche Scientifique-Eau, de la Université de Québec y a los profesores Olivier Banton y Pierre Lafrance por su apoyo y valiosos comentarios en el transcurso de la investigación.

Este trabajo forma parte de un proyecto de investigación (Ref:AGR91-1165) del Plan Nacional de Investigaciones Científicas y Desarrollo Tecnológico (Programa Nacional de Investigación Agraria).

BIBLIOGRAFIA

ADDISCOTT, T.M. (1983). Kinetics and temperature relationships of mineralization and nitrification in Rothmsted soils with differing histiries. *J. Soil Sci.*, 34: 343-353.

ALBERTO, J.M. (1993). Simulación de flujo y transporte de contaminantes en zona no saturada. Aplicación a las parcelas experimentales de S. Augustin (Quebec, Canadá) y Almazora (Castellón. España). *Tesis de Licenciatura. Universidad Jaume I Castelló* 150 pp.

CABON, F., GIRARD, G, y LEDOUX, E. (1991). Modelling of nitrogen cycle in farm land areas.- *Fertilizer Research*, 27: 161-169.

CAMPBELL, C.A., MYERS, R.J.K. y WEIER, K.L. (1981). Potentially mineralizable nitrogen. Decomposition rates and their relationship to temperature for five Queensland soils. *Aust. J. Soil Sci.*, 19: 323-332.

CHAPDELAINE, M.Cl. (1992). Contamination des eaux souterraines par les nitrates. *Memoire de maîtrise, INRS-EAU, Québec, Canada.*

CRAGO, R.D. y BRUTSAERT, W. (1992). A comparison of several evaporation equations. *Water Resources Research*, 28 (3): 951-954.

GROOT, J.J.R. y VERBERNE, E.L.J. (1991). Response of wheat to nitrogen fertilization, a data set to validation simulation models for nitrogen dynamics in crop and soil. *Fertilizer Research*, 27: 245-259.

HANSEN, S., JENSEN, H.E., NIELSEN, N.E. y SVENDSEN, H. (1991). Simutation of nitrogen dynamics and biomass production in winter wheat usind the Danish simulation model DAISY. *Fertilizer Research*, 27: 245-259.

HUWE, B. y VAN DER PLOEG, R.R. (1991). WHNSIM-a soil nitrogen simulation model for Southern Germany. *Fertilizer Research*, 27: 331-339.

JOBIDON, J. (1990) Interdépendance des propiétés physiques des sols dans un model de contamination des eaux souterraines par des pesticides. *Memoire de maîtrise. INRS-EAU, Québec, Canada.*

JOHANSEN, O (1975). Thermal conductivity of soils. *Ph.D. thesis, Trondheim, Norway.*

JOHNSSON, H., BERGSTROM, L., JANSSON, P.E. y PAUSTIAN, K. (1987). Simulated nitrogen dynamics and losses in a layered agricultural soil. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 18: 333-356.

JONES, C.A., BLAND, W.L., RITCHIE, J.T. y WILLIAMS, J.R. (1991). Simulation of root growth. *En "Modeling plant and soil system". Agronomy Monograph nº 31. ASA-CSSA-SSSA.* pp: 91-123.

KALUARACHCHI, J.J. y PARKER, J.C. (1988). Finite element model of nitrogen species transformation and transport in the unsaturated zone. *J. Hydrol.*, 103: 249-274.

KERSEBAUM, K.C. y RICHTER, J. (1991). Modelling nitrogen dynamics in a plant-soil system with a simple model for advisory purposes. *Fertilizer Research*, 27: 273-281.

KLUTE, A. (1986). Methods of soil analysis. *Agromomy momograph* nº9. ASA, Madison (Wisconsin), USA.

LAFRANCE, P, BANTON, O. y VILLENEUVE, J.P. (en prensa). Spatial varability of total carbon, nitrogen and organis matter, and their relationship in a sandy soil in Quebec. Enviado a *Soil Sci. Soc. Am. J.*

MAC DUFF, H.J. y WHITE, R.E. (1985). Net mineralization and nitrification rates in a day soil measured and predicted in : permanent grassland from soil temperature and moisture content. *Plant and Soil*, 86: 151-176.

MANGAJARA, S. y MISRA, C. (1978). Effect of temperature on denitrification. *J. Indian Soc. Soil Sci.*, 4: 401-402.

MENOT, J.M. (1979). Equations of frost propagation in unsatured porous media. *Engineering Geology*, 13: 249-274.

MISHRA, B.K. y MISRA, C. (1991). Leaching of ammonium nitrate under field conditions: studies on kinetics nitrification and nitrate reduction in an ultisol profile. *J. Hydrol.*, 124: 185-195.

MISRA, C., NIELSEN, D.R. y BIGGAR, J.W. (1974a). Nitrogen transformations in soil during leaching: II. Steady state nitrification and nitrate reduction. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 38: 294-299.

MISRA, C., NIELSEN, D.R. y BIGGAr, J.W. (1974b). Nitrogen transformations in soil during leaching: III. Nitrate reduction in soil columns. *Soil Sci. Soc. Am. Proc.*, 38: 300-304.

PADILLA, F. y VILLENEUVE, J.P. (1992) Modelling and experimental studies of frost heave including solute effects. *Cold Regions Sci. and Techn.*, 20: 183-194.

PADILLA, F., CÁMARA, O. y CLUIS, D. (1992). Modelling nitrogen species transformations and transport in the unsaturated zone considering temperature and water content effects. *Proceeding oh the 4th International Conference of Hidraulic Engineering Software. HIDROSOFT '92. Computer Techniques and Applications, W.R. Blain and E. Cabrera (Ed). U.P.V. España 21-24 de Julio de 1992*; pp: 15-26.

STANFORD, G., FRERE, H.M. y SACHWANINGER, D.H. (1973). Temperature coefficient as soil nitrogen mineralization. *Soil Science*, 115: 321-323.

TRÉPANIER, L. (1992). Evaluation de l'applicabilité d'un modèle mathématique simulant le devenir des nitrates dans les eaux souterraines agricoles. *Memoire de maîtrise, INRS-EAU, Québec, Canada.*

WANG, X. y BELOW, F.E. (1992). Root growth, nitrogen uptake, and tillering of wheat induced by mixed-nitrogen source. *Crop Science*, 32: 997-1002.

WHITMORE, A.P., COLEMAN, K.W., BRADBURY, N.J. y ADDISCOTT, T.M. (1991). Simulation of nitrogen in soil and winter wheat crops: modelling nitrogen turnover through organic matter. *Fertilizer Research*, 27: 283-291.

Relación alfabética de autores

Aurelio Agut. Instituto Valenciano de Investigaciones Agrarias (IVIA). Apartado Oficial 46113, Moncada. Valencia. Tel 96-1391000, Fax 96-1390240

Juan Marcos Alberto Vallés. Geólogo. Instituto Valenciano de Investigaciones Agrarias (IVIA). Apartado Oficial 46113, Moncada. Valencia. Tel 96-1391000, Fax 96-1390240

Iñaki Antigüedad Auzmendi. Doctor en Ciencias Geológicas. Departamento de Geodinámica. Facultad de Ciencias. Universidad del País Vasco. 48080 Bilbao. Tel 94-4647700, Fax 94-4648500

L.H. Cammeraat. Vakgroep Fysische Geografie en Bodemkunde. Universiteit van Amsterdam.

Antonio Castillo Martín. Doctor en Ciencias Geológicas. Instituto Andaluz de Geología Mediterránea. CSIC. Facultad de Ciencias. Universidad de Granada. 18071 Granada. Tel 958-243362, Fax 958-243352

Miguel Cerezo García. Biólogo. Grupo de Investigación de Biotecnología. Departamento de Ciencias Experimentales. Universitat Jaume I. Apdo 224. 12080 Castellón. Tel 964-345700, Fax 964-345654

Angel Durán Martínez. Químico. Grupo de Investigación de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Departamento de Ciencias Experimentales. Universitat Jaume I. Apdo 224. 12080 Castellón. Tel 964-345700, Fax 964-345654

María Vicenta Esteller Alberich. Geóloga. Grupo de Investigación de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Departamento de Ciencias Experimentales. Universitat Jaume I. Apdo 224. 12080 Castellón. Tel 964-345700, Fax 964-345654

Pilar García Agustín. Doctora en Ciencias Biológicas. Grupo de Investigación de Biotecnología. Departamento de Ciencias Experimentales. Universitat Jaume I. Apdo 224. 12080 Castellón. Tel 964-345700, Fax 964-345654

Luis Gómez Palma. Departamento de Microbiología. Facultad de Farmacia. Campus de La Cartuja. Universidad de Granada. 18071 Granada

Arsenio González Martínez. Doctor en Ciencias Geológicas. Grupo de Hidrogeología y Medio Ambiente. Escuela Politécnica Superior. Campus de La Rábida. Universidad de Huelva, 21819 Palos de la Frontera (Huelva). Tel. 959-530245, Fax 959-350311

José Antonio Grande Gil. Doctor en Ciencias Geológicas. Grupo de Hidrogeología y Medio Ambiente. Escuela Politécnica Superior. Campus de La Rábida. Universidad de Huelva, 21819 Palos de la Frontera (Huelva). Tel. 959-530245, Fax 959-350311