

LOS MÉTODOS DE DIFERENCIAS FINITAS Y DEL BALANCE INTEGRAL CALÓRICO APLICADOS A LA TOMA MONOESPECIE DE NUTRIENTES POR RAÍCES DE CULTIVOS

María A. Dzioba

Departamento Matemáticas, Facultad de Ciencias Exactas
Universidad Nacional de Río Cuarto, Argentina
e-mail: mdzioba@exa.unrc.edu.ar

Juan. C. Reginato

Departamento Química-Física, Facultad de Ciencias Exactas
Universidad Nacional de Río Cuarto, Argentina
e-mail: jreginato@exa.unrc.edu.ar

Domingo A. Tarzia

Departamento Matemática y CONICET, Facultad Ciencias Empresariales
Universidad Austral (Rosario), Argentina
e-mail: tarzia@uaufce.edu.ar

RESUMEN

Se estudia la toma de nutrientes por raíces de cultivos mediante un modelo de frontera móvil. Se obtienen soluciones mediante la aplicación del método del balance integral. También se encuentra una solución mediante el método de inmovilización de dominio y la subsecuente aplicación del método de diferencias finitas en sus versiones explícita up wind e implícito full. Ambas soluciones se implementan en algoritmos Fortran los cuales se aplican al cálculo de toma de K, Mg y P por raíces de plantines de pino. Se comparan los resultados obtenidos por ambos métodos con resultados experimentales así como con predicciones de otros modelos basados en dominios fijos.

ABSTRACT

The nutrient uptake by roots of crops through a moving boundary model is studied. Solutions through the integral balance method are obtained. Also, a solution through the front-fixing method and the application of finite difference method in his versions explicit up wind and full implicit is obtained. Both solutions are implemented in Fortran algorithms which are applied for to compute the K, Mg and P uptake by seedlings pine. The results of both calculus are compared with experimental results as with predictions of other models based in fixed domains

INTRODUCCIÓN

La toma de nutrientes ha sido evaluada a través de modelos de difusión y de flujo masal los cuáles se basan en aproximaciones numéricas en dominios fijos de ecuaciones diferenciales de transporte en suelo acopladas con cinéticas de absorción por raíces [1,2]. Estos modelos estiman la concentración de nutriente en la interfase raíz-suelo y la toma de nutriente resultante. Otros modelos suponen la superficie

de la raíz comportándose como un sumidero, por consiguiente la toma de nutriente se determina por la tasa de nutriente suplida en la superficie de la raíz por flujo masal y difusión. En estos modelos, el radio del volumen de suelo cilíndrico finito asignado a cada raíz disminuye cuando la densidad de raíces se incrementa [3]. En otros modelos, se usaron soluciones analíticas [4] para calcular el volumen de suelo asignado a cada raíz y la concentración en la superficie de la raíz incluyendo una zona de depleción que aumenta con el tiempo salvo que sea alcanzado el límite de no-transferencia [5]. Recientemente, se han formulado modelos de frontera libre para crecimiento de raíces [6,7,8], esto es, modelos analíticos a través de los cuáles es posible medir la concentración de nutriente en la interfase raíz-suelo y estimar cualitativamente la ley de crecimiento de la raíz (una función del tiempo, a priori, desconocida). Este hecho permite postular un nuevo modelo de toma de nutriente debido al transporte y absorción de iones desde un punto de vista más dinámico. Este modelo difiere de los previos, en que el ritmo de crecimiento de la raíz, ahora se introduce como una función conocida del tiempo, lo mismo que en el modelo de Barber-Cushman. Así, el objetivo de este trabajo es evaluar un modelo de frontera móvil para la toma de nutriente, el cuál tiene en cuenta la competencia creciente de las raíces. Se considera un modelo unidimensional, esto es, una sola raíz cilíndrica en un suelo donde se supone que las condiciones de humedad, luz y temperatura están controladas (como en una cámara de siembra). Con estas hipótesis, se propone el siguiente modelo de toma de nutriente a través de un modelo de frontera móvil a una fase (el suelo) en coordenadas cilíndricas [9,10]:

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + D(1 + \epsilon_0) \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial t}, \quad s_0 < r < R(t), \quad 0 < t < T \quad (1-a)$$

$$C(r, 0) = \varphi(r), \quad s_0 \leq r \leq R_0 \quad (1-b)$$

$$-Db \frac{\partial}{\partial r} C(R(t), t) + v_0 C(R(t), t) = 0, \quad 0 < t < T \quad (1-c)$$

$$Db \frac{\partial}{\partial r} C(s_0, t) + v_0 C(s_0, t) = \frac{k_a [C(s_0, t) - C_u]}{1 + \frac{J_m}{k_a [C(s_0, t) - C_u]}}, \quad 0 < t < T \quad (1-d)$$

$$R(t) = R_0 \sqrt{\frac{l_0}{l(t)}}, \quad 0 < t < T \quad (1-e)$$

donde r es la distancia radial desde el eje de la raíz [m]; t es el tiempo [s]; T es el tiempo máximo para el cual existe solución [s]; C_u es la concentración umbral [mol m^{-3}]; v_0 es la velocidad efectiva del flujo solución sobre la raíz [m s^{-1}]; b es el poder buffer; D es el coeficiente de difusión efectivo [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$]; k_a ($= J_m / K_m$) es el poder de absorción de nutriente [m s^{-1}]; J_m es el influjo máximo [$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$]; K_m es la concentración a la cual el influjo es $J_m/2$ [mol m^{-3}]; $R(t)$ es la semidistancia entre ejes de raíces [m]; φ es el perfil de concentraciones inicial en [s_0, R_0] [mol m^{-3}]; R_0 es la semidistancia inicial entre ejes de raíces [m]; s_0 es el radio inicial de la raíz [m]; $l(t)$ longitud de raíz al tiempo t [m]; l_0 es la longitud inicial de la raíz [m]. $\epsilon_0 = v_0 s_0 / Db$ [parámetro adimensional]. La ecuación (1-a) es la ecuación de transporte de iones en suelo y la condición (1-b) corresponde al perfil de concentraciones iniciales. La condición (1-c) representa flujo nulo sobre $R(t)$. La condición (1-d) representa el balance de masa sobre la raíz y la condición (1-e) representa la frontera móvil $R(t)$ en función de la longitud de raíz instantánea $l(t)$, la cual es conocida a priori. El modelo se resuelve aplicando el método del balance integral [8,11] con lo cual la ecuación diferencial (1-a) se integra en la variable r sobre el dominio ($s_0, R(t)$). Usando una metodología análoga a aquella usada en procesos de cambio de fase, se propone la siguiente expresión para $C(r, t)$:

$$C(r,t) = \varphi(r) \left[1 + \beta(t) \left(1 - \frac{r}{R(t)} \right)^2 \right] \quad (2)$$

con:

$$\varphi(r) = C_R e^{-\alpha(R_0 - r)}, \quad \varepsilon = \frac{V_0}{Db} = \frac{\varepsilon_0}{s_0} \quad (3)$$

donde C_R es la concentración inicial de ión en solución suelo en $r = R_0$ [mol m^{-3}]. La expresión (2) para la concentración verifica la condición inicial (1-b) tomando $\beta(0) = 0$ y la condición de contorno (1-c). Después de manipulaciones algebraicas elementales y teniendo en cuenta el caso particular de un crecimiento longitudinal de raíz lineal, dado por $l(t) = l_0 + kt$, se obtiene la siguiente ecuación diferencial para $\beta(t)$ ⁽¹²⁾:

$$\begin{cases} \frac{d\beta(t)}{dt} = \frac{F_2(R(t), \beta(t))}{F_1(R(t))}, & \beta(0) = 0 \\ R(t) = R_0 \sqrt{\frac{l_0}{l_0 + kt}} \end{cases} \quad (4)$$

donde las funciones reales F_1 y F_2 están dadas en [12].

El sistema [4] se resuelve mediante el método de Runge-Kutta para ecuaciones diferenciales ordinarias, el cual fue implementado en un programa FORTRAN. La toma total de nutriente se puede obtener a partir de la siguiente fórmula, la cual puede ser considerada como una versión modificada de la fórmula de Cushman [1,13].

$$U = 2\pi s_0 l_0 \int_{t=0}^{t=t_{\max}} J_c(t) dt + 2\pi s_0 \int_{t=0}^{t=t_{\max}} \left[\int_{t=t}^{t=t_{\max}} J_c(t) dt \right] \dot{l}(t) dt$$

$$J_c(t) = \frac{k_a [C(s_0, t) - C_u]}{1 + \frac{k_a [C(s_0, t) - C_u]}{J_m}} \quad (5)$$

donde $J_c(t)$ es el influjo, $\dot{l}(t)$ es el ritmo de crecimiento longitudinal y U es calculada desde $t = 0$ a $t = t_{\max}$.

El método de inmovilización de dominio y diferencias finitas

Otro método para obtener la solución del modelo matemático (1) es el de la inmovilización del dominio y la subsiguiente aplicación de diferencias finitas en su versión explícita. Para inmovilizar el dominio $[s_0, R(t)]$ llevándolo al intervalo $[0,1]$ se realiza la siguiente transformación:

$$\begin{cases} y = \frac{r - s_0}{R(t) - s_0}, & t = t \\ \Psi(y, t) = C(r, t) \end{cases}$$

obteniéndose para el problema (1) la ecuación y las condiciones siguientes:

$$\frac{D\Psi_{yy}(y,t)}{[R(t)-s_0]^2} + \left\{ \frac{D(1+\epsilon_0)+s_0 \dot{R}(t)y + [R(t)-s_0] \dot{R}(t)y^2}{[R(t)-s_0]^2 y + s_0 [R(t)-s_0]} \right\} \Psi_y(y,t) = \Psi_t(y,t), \quad 0 \leq y \leq 1, \quad 0 < t < T \quad (6-a)$$

$$\Psi(y,0) = \phi(y[R_0 - s_0] + s_0), \quad 0 \leq y \leq 1 \quad (6-b)$$

$$-\frac{Db}{[R(t)-s_0]} \Psi_y(1,t) + v_0 \Psi(1,t) = 0, \quad 0 < t < T \quad (6-c)$$

$$\frac{Db}{[R(t)-s_0]} \Psi_y(0,t) + v_0 \Psi(0,t) = \frac{k_a [\Psi(0,t) - \Psi_u]}{1 + \frac{k_a [\Psi(0,t) - \Psi_u]}{J_m}}, \quad 0 < t < T \quad (6-d)$$

$$R(t) = R_0 \sqrt{\frac{l_0}{l_0 + kt}} \quad (6-e)$$

donde $\Psi_u = C_u$ y $\dot{R}(t)$ representa la derivada de R respecto de t .

La ecuación y condiciones (6) resultantes se aproximan por diferencias finitas [15], hacia adelante en el tiempo, centradas en el espacio para la derivada segunda y hacia adelante y atrás, para la derivada primera. Para ello se propone:

$$A(t) = \frac{D}{R(t)-s_0}, \quad A_1(t) = \frac{A(t)}{R(t)-s_0}$$

$$B(y,t) = \frac{D_1 + s_0 \dot{R}_1(t)y + R_1(t) \dot{R}_1(t)y^2}{R_1^2(t)y + s_0 R_1(t)}$$

donde $D_1 = D(1+\epsilon_0)$, $R_1(t) = R(t) - s_0$. Se considera una malla uniforme en el espacio y en el tiempo del dominio rectangular $[0,1] \times [0,t_{\max}]$, donde $t_{\max} < T$, con pasos Δy en el espacio y con paso Δt en el tiempo respectivamente. Se nota con:

$$\begin{cases} y_j = j\Delta y, \quad j = 0, \dots, M \quad \text{con} \quad M\Delta y = 1 \\ t^n = n\Delta t, \quad n = 0, \dots, N \quad \text{con} \quad N\Delta t = t_{\max} \\ \Psi(y_j, t^n) = \Psi_j^n: \text{valor de } \Psi \text{ en el punto } y_j \text{ al tiempo } t^n \end{cases}$$

donde los puntos (y_j, t^n) son los nodos del dominio discretizado. Aplicando diferencias finitas explícitas se obtiene una ecuación en diferencias y de ésta las correspondientes fórmulas iterativas para los puntos interiores del dominio. Cuando $B_j^n < 0$ (B_j^n : valor de $B(y,t)$ en el nodo (j,n)) la primera derivada se aproxima con diferencias hacia atrás y la ecuación (6-a) resulta:

$$\Psi_j^{n+1} = \left[B_j^n \frac{\Delta t}{\Delta y} - 2A_1^n \frac{\Delta t}{\Delta y^2} + 1 \right] \Psi_j^n + \left[A_1^n \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right] \Psi_{j+1}^n + \left[A_1^n \frac{\Delta t}{\Delta y^2} - B_j^n \frac{\Delta t}{\Delta y} \right] \Psi_{j-1}^n \quad (7-a-i)$$

con:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta y^2}{2A_1^n - B_j^n \Delta y} \quad \forall n$$

donde $A_1^n = A_1(t^n)$.

Cuando $B_j^n > 0$ la derivada primera se aproxima con diferencias hacia adelante y por ello de la ecuación (6-a) resulta:

$$\Psi_j^{n+1} = \left[-B_j^n \frac{\Delta t}{\Delta y} - 2A_1^n \frac{\Delta t}{\Delta y^2} + 1 \right] \Psi_j^n + \left[A_1^n \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right] \Psi_{j-1}^n + \left[A_1^n \frac{\Delta t}{\Delta y^2} + B_j^n \frac{\Delta t}{\Delta y} \right] \Psi_{j+1}^n \quad (7-a-ii)$$

con:

$$\Delta t \leq \frac{\Delta y^2}{2A_1^n + B_j^n \Delta y} \quad \forall n$$

El perfil de concentración inicial dado por la condición (6-b) se transforma en:

$$\Psi(y_j, 0) = \varphi(y_j | [R_o - s_o] + s_o), \quad \forall j \quad (7-b)$$

Los valores B_j^n para los distintos nutrientes considerados pueden ser positivos y/o negativos según sea el punto y el tiempo considerados. Por ello, en cada caso se aplica una u otra fórmula iterativa.

La condición en el borde $y = 1$ se aproxima con diferencias hacia atrás y por lo tanto la condición (2-c) resulta:

$$\Psi(1, t^n) = \frac{Db \Psi(1 - \Delta y, t^n)}{Db - v_o \Delta y R_1(t^n)} \quad (7-c)$$

con

$$\Delta y < \frac{Db}{v_o (R_o - s_o)}$$

a los efectos de garantizar $\Psi(1, t^n) > 0$, para todo n.

La condición en el borde $y = 0$ se aproxima con diferencias hacia delante de la cual resulta una ecuación de segundo grado en $\Psi(0, t^n)$. Se comprueba que el discriminante y el término independiente son positivos y que el coeficiente del término de mayor grado es negativo; por lo tanto, el producto de las dos raíces es negativo, y en consecuencia las raíces tienen distinto signo. Debido a que se trabaja con concentraciones, se toma la única raíz que resulta positiva. De la condición (6-d) resulta:

$$\alpha(t^n) \Psi^2(0, t^n) + \beta(t^n) \Psi(0, t^n) + \gamma(t^n) = 0 \quad (7-d)$$

donde los coeficientes α , β y γ están dados por:

$$\alpha(t^n) = v_o - \frac{A(t^n)b}{\Delta y} < 0, \quad \forall n$$

$$\beta(t^n) = \frac{A(t^n)b}{\Delta y} \Psi(\Delta y, t^n) + \left(v_o - \frac{A(t^n)b}{\Delta y} \right) (K_m - \Psi_u) - J_m$$

$$\gamma(t^n) = (K_m - \Psi_u) \frac{A(t^n)b}{\Delta y} \Psi(\Delta y, t^n) + J_m \Psi_u$$

La única raíz positiva de la ecuación (7-d) viene dada por la expresión siguiente:

$$\Psi(0, t^n) = \frac{[\beta + \sqrt{\beta^2 + 4\gamma(-\alpha)}]}{2(-\alpha)}$$

la cual resulta positiva cualquiera sea el valor de β .

Por último, la ecuación de la frontera móvil (6-e) discretizada resulta:

$$R(t^n) = R_o \sqrt{\frac{l_o}{l_o + kt^n}}, \quad \forall n. \quad (7-e)$$

El problema (6) también es resuelto por el método de diferencias finita en su versión implícita full. Así la ecuación y condiciones (6) resultantes se aproximan por diferencias finitas hacia atrás en el tiempo, centradas en el espacio para la derivada segunda y hacia adelante y atrás según el signo de $B(y,t)$ para la derivada primera, resultando las siguientes ecuaciones para los nodos interiores:

$$\Psi_j^n = \left[B_j^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y} - A_1^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right] \Psi_{j-1}^{n+1} + \left[1 + 2A_1^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} - B_j^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right] \Psi_j^{n+1} - \left[A_1^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right] \Psi_{j+1}^{n+1} \quad \text{para } B_j^n < 0 \quad (8-a)$$

$$\Psi_j^n = \left[-A_1^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} \right] \Psi_{j-1}^{n+1} + \left[1 + 2A_1^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} + B_j^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right] \Psi_j^{n+1} - \left[A_1^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y^2} + B_j^{n+1} \frac{\Delta t}{\Delta y} \right] \Psi_{j+1}^{n+1} \quad \text{para } B_j^n > 0 \quad (8-b)$$

y las ecuaciones de contorno ahora resultan:

$$\Psi(1, t^{n+1}) - \frac{Db}{Db - v_o \Delta y R_1(t^{n+1})} \Psi(1 - \Delta y, t^{n+1}) = 0 \quad \text{en el borde } y = 1 \quad (8-c)$$

$$\Psi(0, t^{n+1}) + \frac{1}{\left[\frac{v_o \Delta y}{A^{n+1} b} - 1 \right]} \Psi(1, t^{n+1}) = \frac{k_a}{\left[v_o - \frac{A^{n+1} b}{\Delta y} \right]} \left[\frac{\Psi(0, t^n) - \Psi_u}{1 + \frac{k_a [\Psi(0, t^n) - \Psi_u]}{J_m}} \right] \quad \text{en el borde } y = 0 \quad (8-d)$$

Las ecuaciones del problema (8) constituyen un sistema de ecuaciones lineales cuya matriz de coeficientes resulta ser una matriz tridiagonal.

Las ecuaciones en diferencias para los problemas (7) y (8) son resueltas mediante sendos algoritmos en lenguaje FORTRAN [17].

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En la Tabla 1 se comparan las predicciones de toma de nutriente obtenidas para toma de nutrientes como K, P y Mg por plantines de pino⁽¹⁴⁾ obtenidas por el modelo de Barber-Cushman así como por el modelo de frontera móvil en sus dos soluciones numéricas: el balance integral y el método de diferencias finitas en su versión explícita. El método de diferencias finitas en su versión implícita full se encuentra

en la etapa de depuración del algoritmo Fortran y presumimos que los resultados a obtener por este método mejoren los obtenidos hasta ahora por la versión explícita debido a la estabilidad y a su independencia del paso de tiempo.

TABLA 1. Comparación de predicciones del modelo de frontera móvil respecto al modelo de Barber-Cushman

Ion	Toma Medida (mmol/maceta)	Toma predicha (mmol/maceta)					
		Modelo de Barber-Cushman		Modelo Frontera Móvil (Balance Integral)		Modelo Frontera Móvil (Inm. Dom./ Dif. Finitas Expl.)	
			Error		Error		Error
Mg	1.617	0.625	61.3	0.680	57.1	0.181	88.9
K	6.663	6.285	5.6	6.653	0.15	7.372	10.6
P	1.332	1.185	11	1.302	2.25	1.371	2.9

Los resultados muestran que el método del 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 suelo¹⁶. El método de diferencias finitas produce resultados similares al método de balance integral para K y P. Los resultados mostrados en la Tabla 1 pueden apreciarse en la Figura 1.

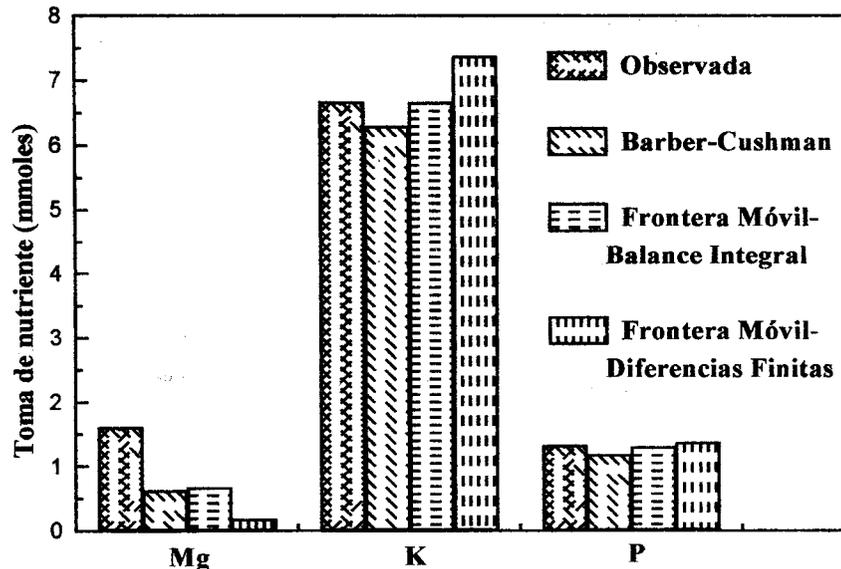


Figura 1. Gráfico comparativos de tomas de nutriente observada y predicha por los modelos de Barber-Cushman, de frontera móvil con balance integral y frontera móvil con diferencias finitas

REFERENCIAS

- [1] 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
- [2] Barber, S.A. *Soil nutrient bioavailability. A mechanistic approach*, J. Wiley, New York (1984)
- [3] Hoffland, E., H.S. Bloemhof, G.R. Findenegg, P.A. Leffelaar, and J. Nelemans. *Simulation of nutrient uptake by a growing root systems considering increasing root density and inter-root competition. In "Plant Nutrition-Physiology and Applications*. Ed. M.L. van Beusichem, 9-15. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, The Netherlands (1990)
- [4] Nye, P.H., and P.B. Tinker. *Solute movement in the soil-root system*. Blackwell Scientific, Oxford, England (1977)
- [5] Smethurst, P.; and N.B. Comerford. *Simulating nutrient uptake by single or competing and contrasting root systems*. Soil Sci. Soc. Am. J. 57, 1993, pags.:1361-1367
- [6] 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
- [7] 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
- [8] 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
- [9] Crank, J. *Free and Moving Boundary Problems*. Clarendon Press, Oxford (1984)
- [10] Tarzia, D.A. *A Bibliography on Moving-Free Boundary Problems for the Heat-Diffusion Equation. The Stefan and Related Problems*. MAT, Serie A, Rosario, # 2 (2000)
- [11] Goodman, T.R. *The heat-balance integral and its applications to problems involving a change of phase*, Transf. of the ASME 80, 1958, pags.:335-342
- [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] Claassen, N.; Barber, S.A. *A Method for Characterizing the Relation between Nutrient Concentration and Flux into Roots of Intact Plants*. Plant Physiol. 54, 1974, pags.:564-568
- [14] Kelly, J.M., S.A. Barber y G.S. Edwards. *Modeling magnesium, phosphorus and potassium uptake by loblolly pine seedling using a Barber-Cushman approach*. Plant and Soil 139, 1992, pags.:209-218
- [15] Morton, K.W., Mayers, D.F. *Numerical Solutions of Partial Differential Equations*, Cambridge University Press (1994)
- [16] 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
- [17] 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)