

# Modelado de la Concentración de Pesticidas en Campos de Arroz Mediante el Modelo de Fugacidad del Nivel IV acoplado a la Ecuación Dispersión-Advección

W.A. Contreras<sup>1,2</sup> , D. Ginestar<sup>2</sup> , L.C. Paraíba<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Universidad de Pamplona, Facultad de Ciencias Básicas,  
Departamento de Matemáticas,  
Km 1 way Bucaramanga, Colombia,  
wilcones@doctor.upv.es, wcontre@unipamplona.edu.co

<sup>2</sup> Instituto de Matemática Multidisciplinar.  
Universidad Politécnica de Valencia.  
Camino de Vera, 14, 46022. Valencia. Spain.  
dginesta@mat.upv.es

<sup>3</sup> EMBRAPA Meio Ambient, Rodovia Campinas Mogi-Mirim,  
SP 340 km 127.5. CxP: 69. CEP 13820-000.  
Jaguariúna (São Paulo). Brazil. lourival@cnpma.embrapa.br

## Abstract

Se presenta la simulación numérica del modelo de fugacidad del nivel IV acoplado a la ecuación dispersión-advección, para modelar la concentración de pesticidas en campos de arroz. El modelo simula la dinámica de distribución de pesticida en un sistema compartimental constituido por aire, agua, planta de arroz, sedimento y suelo. El modelo de fugacidad del nivel IV está representado mediante un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, que consideran las fugacidades, consecuentemente, la concentración del pesticida en aire, agua, planta de arroz y sedimento. La ecuación dispersión-advección simula la lixiviación del pesticida en el suelo, considerando la dispersión hidrodinámica, la degradación del pesticida, la tasa de adsorción del pesticida en el perfil saturado del suelo.

# 1 Introducción

Algunos de los sistemas y procesos estudiados mediante modelado matemático son de vital importancia en la gestión de los recursos naturales y para la toma de decisiones sobre los mismos, tal es el caso del estudio del calentamiento global por el incremento de concentraciones de  $CO_2$ , modelos de estimación de los recursos que se utilizan para predecir la extracción de petróleo en zonas ecológicamente sensibles y muchos otros más. En nuestro caso, el modelado matemático nos permite abordar problemas derivados del uso de insumos en la agricultura y analizar el efecto de ciertas prácticas agrícolas como el riego, el abonado o la aplicación de productos fitosanitarios.

Este estudio se ha dedicado a desarrollar modelos matemáticos basados en la teoría termodinámica de la fugacidad y en la dinámica del transporte de contaminantes en el suelo, desde el enfoque de sistemas compartimentales. Para estos modelos, se plantea un modelo de fugacidad del nivel IV, representado mediante un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias lineales, acoplado a la ecuación dispersión advección. El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias lineales, representan un sistema compartimental, cuyo balance de masa depende de la variable temporal. Las variables del sistema representa las concentraciones de un determinado contaminante en cada uno de los compartimentos del sistema. En un principio, el modelo está orientado a calcular la concentración en un campo de cultivo de arroz, por lo que los compartimentos están dados por agua, aire, sedimento y planta. Este sistema compartimental así planteado carece de una parte fundamental, un compartimento que represente la concentración del contaminante en la solución de suelo, por lo que es necesario insertar un nuevo subsistema o compartimento al sistema, en éste compartimento el balance de masa depende de las variables temporal y espacial, por lo que está representado por una ecuación en derivadas parciales unidimensional, la ecuación dispersión-advección, que describe el transporte del contaminante en la solución del suelo.

Existen hoy por hoy una gran variedad de modelos utilizados para describir el movimiento de plaguicidas en el ambiente, siendo uno de los más utilizado los modelos en los cuales el concepto de fugacidad se usa como la fuerza conductora de los procesos de partición del compuesto entre los compartimentos del sistema evaluado, estos modelos fueron introducidos por Mackay y Paterson [1]. Estos modelos basados en la fugacidad están clasificados en niveles de complejidad [2]. Se consideran progresivamente desde el nivel I hasta el nivel IV, partiendo de una fugacidad en un estado de equilibrio estable en el nivel I, agregando reacciones y advecciones en el nivel II, introduciendo parámetros de transferencia entre compartimentos y de-

scribiendo un sistema ambiental como un estado estacionario en el tiempo con distribución no equilibrada en el que cada compartimento puede tener diferentes fugacidades en el nivel III; hasta llegar a describir una situación en que la dinámica de distribución no está en estado de equilibrio estable en el modelo del nivel IV, representado por la ecuación,

$$V_i Z_i \frac{df_i}{dt} = E_i + G_i C_{Bi} - G_i Z_i f_i - k_r^i V_i Z_i f_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n d_{ij} (f_i - f_j), \quad i = 1, \dots, n,$$

donde se describe una situación no estacionaria de la dinámica de la fugacidad de un compuesto en un sistema de  $n$  compartimentos y es detallada en [3].

En lo referente al transporte y degradación de contaminantes en el suelo, se puede decir que ha sido ampliamente estudiado y su teoría establecida desde hace tiempo [4]; sin embargo las primeras soluciones analíticas [5] quedan restringidas a condiciones de frontera extremadamente simples; estudios más recientes han introducido condiciones iniciales de frontera más complejas [6]. Para los experimentos del transporte y degradación de contaminantes se suele utilizar una columna de suelo, con el fin de obtener información cuantitativa sobre el movimiento y la transformación de estos contaminantes en el suelo. Este tipo de experimentos son necesarios para la incorporación de nuevos pesticidas y la aprobación de los ya existentes, requeridos por las agencias de protección del medio ambiente, tal es el caso de la EPA (U.S. Environmental Protection Agency) en Estados Unidos y BBA (Federal Biological Research Center for Agriculture and Forestry) en Alemania.

## 2 Modelo de Fugacidad del Nivel IV

El balance total de masa de la ecuación dada por el modelo de fugacidad del nivel IV es dado por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias [3],

$$\begin{aligned}
\frac{df_a}{dt} &= \frac{d_{wa}f_w}{V_a Z_a} + \frac{d_{ra}f_r}{V_a Z_a} + \frac{G_a C_{Ba}}{V_a Z_a} - \frac{d_{aw}f_a}{V_a Z_a} - \frac{d_{ar}f_a}{V_a Z_a} \\
&\quad - \frac{G_a f_a}{V_a} - \lambda_a f_a \\
\frac{df_w}{dt} &= \frac{d_{aw}f_a}{V_w Z_w} + \frac{d_{rw}f_r}{V_w Z_w} + \frac{d_{sw}f_s}{V_w Z_w} + \frac{G_w C_{Bw}}{V_w Z_w} - \frac{G_w f_w}{V_w} \\
&\quad - \frac{d_{wa}f_w}{V_w Z_w} - \frac{d_{ws}f_w}{V_w Z_w} - \frac{d_{wr}f_w}{V_w Z_w} - \lambda_w f_w \\
\frac{df_r}{dt} &= \frac{d_{wr}f_w}{V_r Z_r} + \frac{d_{ar}f_a}{V_r Z_r} - \frac{d_{rw}f_r}{V_r Z_r} - \frac{d_{ra}f_r}{V_r Z_r} - \lambda_r f_r \\
\frac{df_s}{dt} &= \frac{d_{ws}f_w}{V_s Z_s} + \frac{G_s C_{Bs}}{V_s Z_s} - \frac{G_s f_s}{V_s} - \frac{d_{sw}f_s}{V_s Z_s} - \lambda_s f_s.
\end{aligned} \tag{1}$$

Con las condiciones iniciales dadas por  $f_a(0) = f_r(0) = f_s(0) = 0$  y  $f_w(0) = (A_r P_d) / (V_w Z_w)$ , donde  $A_r$  ( $m^2$ ) es el área de la plantación de arroz,  $P_d$  ( $mol\ m^{-2}$ ) es la dosis de aplicación del pesticida,  $V_a$  ( $m^3$ ) es el volumen del aire,  $V_w$  ( $m^3$ ) es el volumen total de agua,  $V_r$  ( $m^3$ ) es volumen total de plantas de arroz y  $V_s$  ( $m^3$ ) es el volumen total de sedimento. Para  $i \in \{a, w, r, s\}$  y  $t \geq 0$ , la concentración  $C_i = C_i(t)$  es determinada por  $C_i(t) = Z_i f_i$ , entonces la solución del sistema de ecuaciones diferenciales,  $f_i = f_i(t)$ , es conocida.

En la Figura 1 se muestra la emisión, transferencia, degradación y la advección de una sustancia en, y entre, los compartimentos aire, agua, planta de arroz y sedimento.

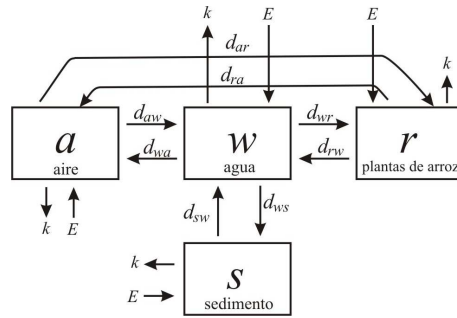


Figure 1: Representación gráfica de los compartimentos que intervienen en el modelo de fugacidad del nivel IV

### 3 Modelo acoplado con la ecuación diespección- advección

Cuando la columna de suelo forma parte del sistema, se deben agregar nuevos términos al sistema (1) [3]. Todo el proceso se puede representar gráficamente como aparece en la Figura 2.

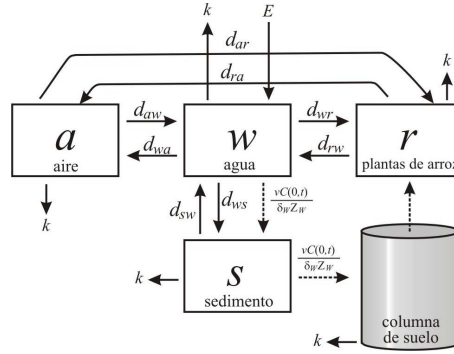


Figure 2: Representación gráfica de los compartimentos que intervienen en el modelo de fugacidad del nivel IV acoplado con una ecuación dispersión -advección

Ahora, el balance total de masa de la ecuación dada por el modelo de fugacidad del nivel IV acoplado con la ecuación dispersión advección viene dado por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales

$$\frac{df_a}{dt} = \frac{d_{wa}f_w}{V_a Z_a} + \frac{d_{ra}f_a}{V_a Z_a} + \frac{G_a C_{Ba}}{V_a Z_a} - \frac{d_{aw}f_a}{V_a Z_a} - \frac{d_{ar}f_a}{V_a Z_a} - \frac{G_a f_a}{V_a} - \lambda_a f_a \quad (2)$$

$$\frac{df_w}{dt} = \frac{d_{aw}f_a}{V_w Z_w} + \frac{d_{rw}f_r}{V_w Z_w} + \frac{d_{sw}f_s}{V_w Z_w} + \frac{G_w C_{Bw}}{V_w Z_w} - \frac{vC(0,t)}{\delta_w Z_w} - \frac{G_w f_w}{V_w} - \frac{d_{wa}f_w}{V_w Z_w} - \frac{d_{ws}f_w}{V_w Z_w} - \frac{d_{wr}f_w}{V_w Z_w} - \lambda_w f_w \quad (3)$$

$$\frac{df_r}{dt} = \frac{d_{wr}f_w}{V_r Z_r} + \frac{d_{ar}f_a}{V_r Z_r} + \frac{Q_w T_{sc} f}{\delta_r V_r Z_r} \int_0^{\delta_r} C(z,t) dz - \frac{d_{rw}f_r}{V_r Z_r} - \frac{d_{ra}f_r}{V_r Z_r} - \lambda_r f_r \quad (4)$$

$$\frac{df_s}{dt} = \frac{d_{ws}f_w}{V_s Z_s} + \frac{G_s C_{Bs}}{V_s Z_s} - \frac{G_s f_s}{V_s} - \frac{d_{sw}f_s}{V_s Z_s} - \lambda_s f_s. \quad (5)$$

Las concentraciones de pesticida en el perfil del suelo, inmediatamente debajo de la capa de sedimento son estimados por la ecuación unidimensional advección-dispersión

$$D_e \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} - R_f \left( \frac{\partial C}{\partial t} - C \left( \mu - \frac{Q_w T_{sc} f}{V_r} \right) \right) = 0. \quad (6)$$

Las condiciones de contorno del modelo están dadas por [?],

$$vC(0, t) - D_e \frac{\partial C(0, t)}{\partial z} = vZ_w f_w(t), \quad t \geq 0 \quad (7)$$

y

$$\frac{\partial C(z_\infty, t)}{\partial z} = 0, \quad t \geq 0, \quad (8)$$

Para el modelo acoplado se asume que la condición inicial está dada por

$$C(z, 0) = 0, \quad 0 < z < \infty. \quad (9)$$

## 4 Solución Numérica

El primer paso para resolver numéricamente el modelo de fugacidad del nivel IV acoplado con una ecuación dispersión-advección, será resolver numéricamente el modelo de fugacidad del nivel IV. Puesto que, las escalas de tiempo para los diferentes compartimentos son de diferente orden de magnitud se utilizarán un esquema implícito de primer orden y un esquema de segundo orden para evitar problemas de estabilidad.

Ahora este sistema de ecuaciones discretizadas puede representarse de forma matricial, para lo que se tienen los vectores

$$\mathbf{f}^{n+1} = \begin{bmatrix} f_a^{n+1} \\ f_w^{n+1} \\ f_r^{n+1} \\ f_s^{n+1} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{f}^n = \begin{bmatrix} f_a^n \\ f_w^n \\ f_r^n \\ f_s^n \end{bmatrix}; \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} \Delta t A_4 \\ \Delta t B_5 \\ H_4 \Delta t \Delta z \sum_{i=0}^{nr-1} C_i^n \\ \Delta t F_3 \end{bmatrix}$$

y la matriz

$$\mathbf{M}_1 = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 & A_3 & 0 \\ B_1 & B_2 & B_3 & B_4 \\ H_1 & H_2 & H_3 & 0 \\ 0 & F_1 & 0 & F_2 \end{bmatrix}$$

Por lo tanto para resolver este sistema por el esquema implícito estará dado de la forma

$$(I - \Delta t \mathbf{M}_1) \vec{f}^{n+1} = \vec{f}^n + \vec{B}.$$

Luego, para la discretizar la ecuación dispersión-advección por el método de Euler implícito es equivalente a utilizar la fórmula de diferencias adelantadas y consiste en hacer

$$\frac{dc_j(t)}{dt} = \frac{c_j((n+1)\Delta t) - c_j((n)\Delta t)}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} \frac{d^2 c_j}{dt^2} \Big|_{\zeta_n},$$

donde  $\zeta_n \in [(n)\Delta t, (n+1)\Delta t]$ . Al discretizar así la derivada obtenemos el siguiente esquema, haciendo  $c_j^n \cong c_j(n\Delta t)$

$$\frac{dc_j}{dt} = (\alpha + \beta) c_{j-1} - (2\alpha - \kappa) c_j + (\alpha - \beta) c_{j+1}.$$

Donde,

$$\alpha = \frac{D}{R\Delta z^2}, \quad \beta = \frac{v}{2R\Delta z}, \quad \kappa = \mu - \frac{Q_w T s c f}{V_r}$$

por lo que se tiene la fórmula en diferencias del método implícito

$$c_j^n = c_j^{n+1} - \Delta t (\alpha + \beta) c_{j-1}^{n+1} + \Delta t (2\alpha - \kappa) c_j^{n+1} - \Delta t (\alpha - \beta) c_{j+1}^{n+1}.$$

El esquema implícito es de la forma

$$(I - \Delta t \mathbf{M}_2) \vec{c}^{n+1} = \vec{c}^n,$$

donde se han definido los vectores

$$\vec{c}^n = \begin{bmatrix} c_0^n \\ \vdots \\ \vdots \\ c_N^n \end{bmatrix}, \quad \vec{c}^{n+1} = \begin{bmatrix} c_0^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ c_N^{n+1} \end{bmatrix},$$

y la matriz

$$\mathbf{M}_2 = \begin{bmatrix} \xi & 2\alpha & 0 & & 0 \\ (\alpha + \beta) & -(2\alpha - \kappa) & (\alpha - \beta) & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & (\alpha + \beta) & -(2\alpha - \kappa) & (\alpha - \beta) \\ 0 & & & 0 & 2\alpha & -(2\alpha - \kappa) \end{bmatrix}$$

Ahora bien, teniendo en cuenta el término que hace el acople del sistema entre las ecuaciones diferenciales ordinarias y la ecuación en derivadas parciales, denotado por  $\delta$  y asociado a  $f_w$ , que se encuentra en la condición de contorno superior de la ecuación dispersión-advección, se puede afirmar que la resolución numérica del modelo de fugacidad del nivel IV acoplado a una ecuación dispersión-advección, es resolver en cada paso del tiempo un sistema de ecuaciones lineales. Este sistema está representado por la siguiente estructura de bloques.

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_1 & \begin{matrix} 0 \\ -\frac{v}{\delta_w Z w} \\ 0 \\ 0 \end{matrix} & 0 \\ \hline 0 & \delta & 0 & 0 & -\xi & 2\alpha & 0 & \dots \\ \hline 0 & & & (\alpha + \beta) & 0 & & & \mathbf{M}_2 \\ & & & \vdots & & & & \\ & & & 0 & & & & \end{bmatrix}$$



$$\mathbf{F}^{n+1} = \begin{bmatrix} \mathbf{f}^{n+1} \\ \hline C_0^{n+1} \\ \hline \mathbf{C}^{n+1} \end{bmatrix}; \mathbf{F}^n = \begin{bmatrix} \mathbf{f}^n \\ \hline C_0^n \\ \hline \mathbf{C}^n \end{bmatrix}; \mathbf{BN} = \begin{bmatrix} \mathbf{Bn} \\ \hline 0 \\ \hline 0 \\ \vdots \\ \hline 0 \end{bmatrix}$$

donde,

$$\mathbf{C}^{n+1} = \begin{bmatrix} C_1^{n+1} \\ C_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ C_N^{n+1} \end{bmatrix}; \mathbf{C}^n = \begin{bmatrix} C_1^n \\ C_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ C_N^n \end{bmatrix}; \mathbf{Bn} = \begin{bmatrix} \Delta t A_4 \\ \Delta t B_5 \\ H_4 \Delta t \Delta z \sum_{i=0}^{nr-1} C_i^n \\ \Delta t F_3 \end{bmatrix}$$

Entonces la solución numérica mediante el esquema implícito para el modelo de fugacidad del nivel IV acoplado con una ecuación dispersión-advección viene dado en forma compacta por,

$$(I - \Delta t \mathbf{M}) \vec{F}^{n+1} = \vec{F}^n + B\vec{N}.$$

## References

- [1] Mackay, D., Paterson, S. Calculating fugacity. Environ. Sci. Technol., 15(9), 1006–1014, 1981.
- [2] Paraiba, L.C., Carrasco, J.M., Bru, R. Level IV fugacity model by a continuous time control system. Chemosphere, 38(8), 1763-1775, 1999.

- [3] Contreras, W.A., Ginestar D., Paraíba, L.C., Bru, R. Modelling the pesticide concentration in a rice field by a level IV fugacity model coupled with a dispersion-advection equation. *Computers and Mathematics with Applications*, 56 (2008) 657-669, 2008
- [4] Taylor, G.I. The Dispersion of matter in turbulent flow through a pipe. *Proc. Soc. London Ser.*, -223, pp. 446-468, 1954.
- [5] Crank, J.A. *The mathematics of diffusion*. Oxford Univ. Pres (Clarendon), London and Nueva York, 1956.
- [6] Freijer, J.I., Veling, E.j.M., Hassanizadeh, S.M. Analytical solutions of the convection-dispersion equation applied to transport of pesticides in soil columns. *Environmental modelling and software* 13(1998)139-149, 1998.