

ANOXIA EN AGREGADOS ESFÉRICOS DE SUELOS SATURADOS. UN MODELO DE FRONTERA LIBRE

Adriana M. González^a, Juan C. Reginato^b y Domingo A. Tarzia^c

^a *Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales,
Universidad Nacional de Río Cuarto, (X5804BYA) Río Cuarto, Argentina*
*agonzalez@exa.unrc.edu.ar

^b *Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales, Universidad
Nacional de Río Cuarto, (X5804BYA) Río Cuarto, Argentina*

^c *Departamento de Matemática y Conicet, Facultad de Ciencias Empresariales, Universidad
Austral, (S2000FZF) Rosario, Argentina*

Palabras Clave: Difusión de Oxígeno, Frontera Libre, Agregados Esféricos de Suelos

Resumen. Un modelo de frontera libre para describir la difusión de oxígeno en agregados esféricos de suelo con absorción constante simultánea es formulado. El modelo es resuelto numéricamente mediante una modificación del método integral restringido de Gupta y Banik y analíticamente para el caso estacionario. Los resultados del modelo son acordes con aquellos obtenidos por autores previos quienes resolvieron el problema en dominios fijos (Currie, Stepniewsky). Asimismo los resultados son comparados con los obtenidos por Sierra para la difusión de oxígeno acoplada con producción de dióxido de carbono debido a microorganismos. De la comparación, se concluye, en primera aproximación, que el modelo de frontera libre puede representar una nueva perspectiva de estudio del problema para el caso general de difusión de oxígeno con absorción de oxígeno y producción de dióxido de carbono simultáneas.

1 INTRODUCCION

La producción de cultivos está afectada por la oxigenación insuficiente y la generación de anhídrido carbónico por actividad microbiana de los suelos. Diversos autores han estudiado los mecanismos de los problemas de aireación en los sistemas de producción mediante modelos de simulación donde se resuelven ecuaciones diferenciales sobre dominios fijos con variadas condiciones iniciales y de contorno (Sierra et al., 1994, Renault y Stengel, 1994, Sierra y Renault, 1995, Glinski y Stepniewski, 1982).

Los problemas de frontera libre generalmente están asociados con procesos de conducción del calor donde hay cambio de fase o estado (sólido que pasa a líquido o viceversa) pero existe otra clase importante de fronteras libres que no corresponden a un frente de cambio de estado (Tarzia, 2000). Un problema muy conocido de este tipo es el llamado problema de la difusión-consumo de oxígeno en tejidos vivos, estudiado por Crank, en el cual no aparece explícitamente la velocidad de la frontera libre (Crank, 1984). En los últimos años se han estudiado problemas agronómicos relacionados con el crecimiento de raíces de diversos cultivos a través de modelos de frontera móvil y libre (Reginato et al., 1990, 2000, González, 2001). Todos ellos son no lineales y por ende es difícil obtener en general soluciones analíticas.

Se presenta un modelo de frontera libre de tipo implícito para la difusión de oxígeno en agregados esféricos de suelos con término constante de absorción. Introduciendo un cambio de variables el problema se reduce a otro en el espacio unidimensional y el término constante de consumo se transforma en un término equivalente igual a la distancia desde el origen. Se encuentra una solución aproximada usando una modificación del CIN (Constrained Integral Method) propuesto por Gupta y Banik (Gupta y Banik, 1988, 1990). Se determina analíticamente la solución exacta del estado estacionario. Se analiza su validez comparando su resultado con aquellos obtenidos por Currie-Greenwood (Currie, 1961, Greenwood y Goodman, 1967) para término constante de absorción, y Sierra (Sierra, 1995) para absorción no lineal.

2 DESARROLLO

2.1 Descripción del Modelo

Se considera un agregado esférico homogéneo y saturado con agua de radio r_{ag} que consume oxígeno a razón constante M . Se impone sobre el agregado, que se asume libre de oxígeno al tiempo cero, una concentración constante positiva en el borde $r = r_{ag}$. Cuando el oxígeno penetra comienza el proceso de absorción en la región de concentración no nula que va creciendo hacia el centro del medio esférico.

La ecuación que gobierna la difusión-reacción de un gas es la ecuación de la difusión en coordenadas esféricas con fuente constante negativa M , y coeficientes de difusión y porosidad D y ε respectivamente; es decir,

$$\varepsilon C_t = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (D r^2 C_r) + M \quad , \quad s(t) < r < r_{ag} \quad , \quad t > 0 \quad (1)$$

donde $\varepsilon > 0$ es la porosidad del agregado, $C = C(r,t)$ es la concentración interna del gas transformada en concentración de equilibrio en aire [mol m^{-3}], t es el tiempo [seg], r es la

distancia desde el centro de la esfera [m], $D > 0$ es el coeficiente constante de difusión del gas disuelto en la solución suelo [$\text{m}^2 \text{seg}^{-1}$], $M < 0$ es el término constante de consumo de oxígeno [$\text{mol m}^{-3} \text{seg}^{-1}$] y $s = s(t)$ es la frontera libre [m] (el radio de la frontera esférica al tiempo t) que representa al frente de aireación en el agregado.

Debido a que no hay flujo desde $s = s(t)$ hacia el interior del agregado se tiene

$$C(s(t), t) = C_r(s(t), t) = 0 \quad , \quad t > 0. \quad (2)$$

La condición en el borde $r = r_{ag}$ y la condición inicial para la frontera libre se expresan

$$C(r_{ag}, t) = C_{ext} \quad , \quad t > 0 \quad (3)$$

$$s(0) = r_{ag} \quad (4)$$

siendo $C_{ext} > 0$ la concentración externa del gas [mol m^{-3}].

Efectuando el cambio de variables

$$x = \frac{r}{r_{ag}} \quad , \quad \tau = \frac{D t}{\varepsilon r_{ag}^2} \quad , \quad u(x, \tau) = \frac{D r C(r, t)}{(-M) r_{ag}^3} \quad , \quad s^*(\tau) = \frac{s(t)}{r_{ag}} = \frac{s(\varepsilon r_{ag}^2 \tau / D)}{r_{ag}}$$

el proceso de difusión descrito por el problema de frontera libre de tipo implícito (1) – (4) se transforma en el siguiente adimensional

$$u_\tau = u_{xx} - x \quad , \quad s^*(\tau) < x < 1 \quad , \quad \tau > 0 \quad (5)$$

$$u(s^*(\tau), \tau) = u_x(s^*(\tau), \tau) = 0 \quad , \quad \tau > 0 \quad (6)$$

$$u(1, \tau) = \frac{D C_{ext}}{(-M) r_{ag}^2} = a_0 \quad , \quad \tau > 0 \quad (7)$$

$$s^*(0) = 1 \quad (8)$$

donde $s^* = s^*(\tau)$ es la nueva frontera libre en el espacio unidimensional correspondiente a $s = s(t)$ en coordenadas esféricas.

2.2 Constrained Integral Method Modificado

En la solución del sistema (5) – (8) se considera un polinomio de grado 2 para la concentración sobre la región $s^*(\tau) < x < 1$, $\tau > 0$; esto es,

$$u(x, \tau) = a(\tau) + b(\tau) \left(\frac{1-x}{1-s^*(\tau)} \right) + c(\tau) \left(\frac{1-x}{1-s^*(\tau)} \right)^2 \quad (9)$$

siendo $a = a(\tau)$, $b = b(\tau)$ y $c = c(\tau)$ parámetros desconocidos a determinar. Teniendo en cuenta las condiciones (6) y (7), el perfil (9) resulta

$$u(x, \tau) = a_0 \left[1 - 2 \left(\frac{1-x}{1-s^*(\tau)} \right) + \left(\frac{1-x}{1-s^*(\tau)} \right)^2 \right] \quad (10)$$

con $s^* = s^*(\tau)$ a determinar.

Para obtener $s^* = s^*(\tau)$ se utiliza el momento cero en la ecuación (5); es decir,

$$\int_{s^*(\tau)}^1 u_\tau(x, \tau) dx = \int_{s^*(\tau)}^1 (u_{xx}(x, \tau) - x) dx. \quad (11)$$

Aplicando la regla de Leibniz en el miembro izquierdo e integrando el miembro derecho, la ecuación (11) se reduce a

$$\frac{d}{d\tau} \left(\int_{s^*(\tau)}^1 u(x, \tau) dx \right) + u(s^*(\tau), \tau) \frac{ds^*(\tau)}{d\tau} = u_x(1, \tau) - u_x(s^*(\tau), \tau) - \frac{1}{2} (1 - s^{*2}(\tau)). \quad (12)$$

Luego de sustituir (10) y (6), y algunas manipulaciones, la frontera libre en el espacio unidimensional $s^* = s^*(\tau)$ correspondiente a $s = s(t)$ en coordenadas esféricas es la única solución del siguiente problema de Cauchy

$$\frac{ds^*(\tau)}{d\tau} = \frac{3}{2} \left[\frac{1 - 4a_0 - 3s^*(\tau) + 3s^{*2}(\tau) - s^{*3}(\tau)}{a_0(1 - s^*(\tau))} \right]; \quad \tau > 0 \quad (13)$$

$$s^*(0) = 1.$$

2.3 Solución Estado Estacionario

El estado estacionario asociado al sistema (1) – (4) está dado por el siguiente problema de frontera libre

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(D r^2 \frac{dC}{dr} \right) + M = 0, \quad s_\infty < r < r_{ag} \quad (14)$$

$$C(r_{ag}) = C_{ext} \quad (15)$$

$$C(s_\infty) = C'(s_\infty) = 0 \quad (16)$$

siendo s_∞ la frontera libre estacionaria en el espacio físico a determinar.

La forma explícita de la concentración estacionaria se obtiene resolviendo la ecuación (14); esto es

$$C(r) = -\frac{M}{6D} r^2 - \frac{e_1}{r} + e_2 \quad (17)$$

con e_1 y e_2 parámetros desconocidos a determinar. Por las condiciones (15) y (16), el perfil (17) resulta

$$C(r) = C_{ext} + \frac{M}{3D} \left(\frac{r_{ag}^2 - r^2}{2} - \frac{s_\infty^3 (r_{ag} - r)}{r_{ag} r} \right) \quad (18)$$

y la frontera estacionaria s_∞ , la única solución de la ecuación

$$B(x) = A, \quad x = \frac{s_\infty}{r_{ag}} \in (0,1) \quad (19)$$

siendo B la función definida por

$$B(x) = x^2 \left(\frac{3}{2} - x \right), \quad x = \frac{s_\infty}{r_{ag}} \in (0,1)$$

y

$$A = \frac{1}{2} + \frac{3D C_{ext}}{M r_{ag}^2}.$$

Teniendo en cuenta que

$$B(0) = 0, \quad B(1) = \frac{1}{2}, \quad B'(x) = 3x(1-x) > 0 \quad \forall x \in (0,1)$$

existe una única solución s_∞ de la ecuación (19) pues $A < 1/2$ debido a que $M < 0$.

3 RESULTADOS

Para analizar los resultados obtenidos con los de otros autores que estudiaron el problema sobre dominios fijos se utilizaron los siguientes datos extraídos de la bibliografía (Sierra, Renault y Valles, 1995) los cuales se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1: Valores de los parámetros usados en la simulación

Parámetros	Valores	Dimensiones
	0.396	adimensional
D	1.43×10^{-11}	$\text{m}^2 \text{seg}^{-1}$
C_{ext}	9.375	mol m^{-3}
r_{ag}	0.012	M
M	-2.71×10^{-5}	$\text{mol m}^{-3} \text{seg}^{-1}$

Los gráficos de la frontera libre $s = s(t)$ en coordenadas esféricas y de la concentración de oxígeno $C = C(r)$ se muestran en las Figuras 1 y 2. El valor final de $s = s(t)$ coincide con s_∞ (la frontera libre estacionaria en el espacio físico).

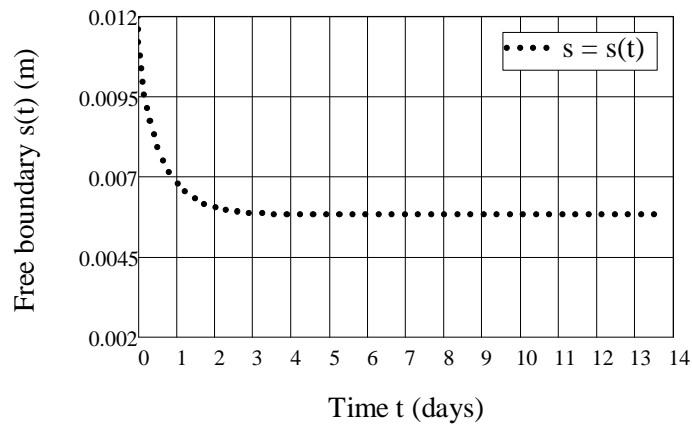


Figura 1: Frontera Libre $s = s(t)$ en coordenadas esféricas.

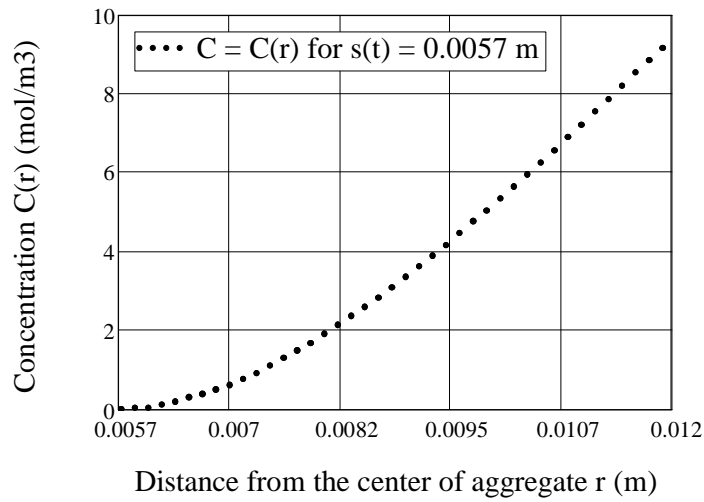


Figura 2: Concentración de Oxígeno $C = C(r)$ para $s_{\infty} = 0.0057$ m

En la Figura 3 se establece una comparación entre los resultados de Currie-Greenwood y los conseguidos usando una modificación del CIN (Constrained Integral Method) para volumen anaeróbico versus concentración externa de oxígeno.

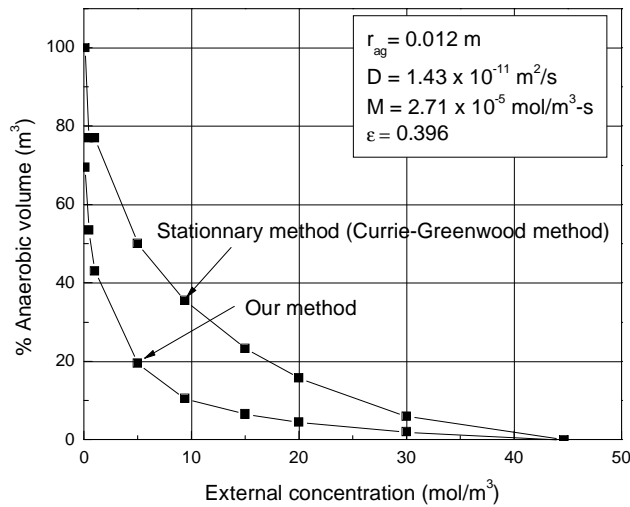


Figura 3: Volumen Anaeróbico versus Concentración Externa

En la Figura 4 (volumen anaeróbico en función del tiempo) se comparan nuestros resultados y los de Currie-Greenwood para tasa constante de consumo, y los de Sierra y otros, para una tasa de consumo variable y no lineal (utilizando una cinética del tipo Michaelis-Menten).

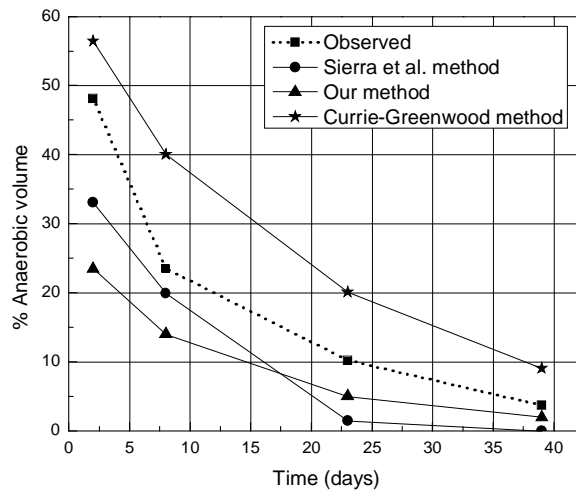


Figura 4: Volumen Anaeróbico versus Tiempo

4 CONCLUSIONES

De la Figura 3 se observa que los volúmenes anaeróbicos predichos por nuestro modelo son menores a los predichos por el modelo de Currie-Greenwood y de la Figura 4 se obtiene que para tiempos mayores que 18 días nuestro modelo con término constante de consumo predice mejor que el propuesto por Sierra con tasa de consumo variable no lineal. Ello implica que las predicciones de este último autor representan mejor el proceso físico en la región donde se inicia el consumo de oxígeno mientras que el modelo de frontera libre predice mejor para regiones interiores. Estas discrepancias ya fueron analizadas por Sierra (Sierra, 1996) quien sugiere que el potencial de respiración microbiana el cual es responsable del consumo de oxígeno puede ser atribuible al hecho físico de no estar homogéneamente distribuido sino que

decrece hacia el centro del agregado. El aporte de nuestro modelo de frontera libre radica en que estas discrepancias pueden ser explicadas en parte por el hecho de que la modelización en dominio variable describe mejor la dinámica de difusión y consumo que los modelos de dominio fijo aportando un algoritmo más eficiente. No obstante, es necesario más experimentación y determinación del fenómeno físico que rige el proceso de consumo de oxígeno para obtener una adecuada descripción del proceso.

5 REFERENCIAS

- Sierra, J., Etude de l' Anoxie dans les Sols á Structure Agrégée en relation avec la Respiration Microbienne. Ph. D. Thesis, Université Claude Bernard, Lyon I, France, 1994.
- Renault, P., Stengel, P. Modelling Oxygen Diffusion in Aggregated Soils: I. Anaerobiosis inside the Aggregates, *Soil Science Society of American Journal*, 58, 4, 1017-1023, 1994.
- Sierra, J., Renault, P. Oxygen Consumption by Soil Microorganisms as affected by Oxygen and Carbon Dioxide Levels, *Applied Soil Ecology*, 2, 175-184, 1995.
- Glinski, J., Stepniowski, W., *Soil Aeration and Its Role for Plants*. CRC Press, Boca Raton – Florida, 1982.
- Tarzia, D.A. *A Bibliography on Free-Moving Boundary Problems for the Heat-Diffusion Equation. The Stefan and Related Problems*. MAT - Serie A, Rosario, 2, 2000 (with 5869 references on the subject, 300 pages). See [www.austral.edu.ar/MAT-SerieA/2\(2000\)/](http://www.austral.edu.ar/MAT-SerieA/2(2000)/).
- Crank, J., *Free and Moving Boundary Problems*. Clarendon Press, Oxford, 1984.
- Reginato, J.C Tarzia, D.A., Cantero, A., On the Free Boundary Problem for the Michaelis-Menten Absorption Model for Root Growth. *Soil Science Society of American Journal*, 150, 4, 1504-1511, 1990.
- Reginato, J.C., Palumbo, M.C., Bernardo, Ch., Moreno, I., Tarzia, D.A. Modelling Nutrient Uptake Using a Moving Boundary Approach. Comparison with the Barber-Cushman Model. *Soil Science Society of American Journal*, 64, 1363-1367, 2000.
- González, A. *Estudios de Anaerobiosis en Agregados Esféricos de Suelos*. Tesis Magistral, Universidad Nacional de Río Cuarto, Argentina, 2001.
- Gupta, R., Banik, N. Constrained Integral Method for Solving Moving Boundary Problems. *Comp. Meth. in Appl. Mech. and Eng*, 67, 211-224. 1988.
- Gupta, R., Banik, N. Diffusion of Oxygen in a Sphere with Simultaneous Absorption. *Appl. Math. Modelling*, 14, 114-121, 1990.
- Currie, J. Gaseous Diffusion in the Aeration of Aggregated Soils. *Soil Science*, 92, 40-45, 1961.
- Greenwood, D., Goodman, D. Direct Measurement of the Distribution of Oxygen in Soil Aggregates and in Columns of Fine Soil Crumbs. *Journal of Soil Science*, 18, 182-196, 1967.
- Sierra, J.; Renault, P; Valles, V. Anaerobiosis in Saturated Soil Aggregates: modeling and experiment, *European Journal of Soil Science*, 46, 519-531, 1995.
- Sierra, J.; Renault, P. Respiratory Activity and Oxigen Distribution in Natural Aggregates in Relation to Anaerobiosis. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 60, 1428-1438, 1996