



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA

Tesis Doctoral

Estimación de Parámetros en Modelos de Transporte de Agua y Nitrógeno en el Suelo

Enero de 2016

Autor:

Carlos Manuel Sánchez De Óleo

Supervisores:

Damián Ginestar Peiró

Antonio Lidón Cerezuela

Resumen

Los modelos de simulación del transporte de agua y nitrógeno en el suelo son útiles para la comprensión del funcionamiento de estos procesos, así como para predecir el comportamiento de los mismos, de modo que puedan utilizarse como herramientas de recomendación para los agricultores cuando se aplican en explotaciones comerciales. Este tipo de modelos se caracterizan por contener una gran cantidad de parámetros asociados a los distintos procesos que modelizan. Algunos de estos parámetros se pueden obtener directamente de experimentos o de la literatura. No obstante, hay otros parámetros que se han de estimar comparando las predicciones de los modelos con datos experimentales que se hayan medido en el campo. Este proceso se conoce como calibración del modelo y se ha de realizar previamente a poder utilizar este tipo de modelos para un cierto cultivo y una explotación determinada.

Las medidas de humedad y contenido de nitrógeno en el suelo son difíciles de realizar, ya que se necesita o bien disponer de equipos especializados, como las sondas de humedad, o realizar muestreos y análisis periódicos que son costosos desde el punto de vista económico además de requerir tiempo para su realización. Así, el número de datos disponible para la calibración de los modelos de transporte de agua y nitrógeno no es muy elevado y, por ello, la estimación de parámetros de estos modelos presenta el problema conocido como sobreparametrización, esto es se pueden encontrar distintos conjuntos de parámetros de forma que las predicciones del modelo pasen por los puntos experimentales disponibles. Para resolver este problema, se ha optado por reducir el número de parámetros a estimar, fijando los otros parámetros en un valor típico. Para ello, es necesario disponer de un criterio de elección de qué parámetros se utilizan en el proceso de optimización asociado a la calibración.

En este trabajo se han evaluado dos métodos de análisis de sensibilidad global de modelos, para determinar cuales son los parámetros más sensibles de los modelos LEACHN y EU-Rotate_N, que simulan el comportamiento del agua y nitrógeno en el suelo de dos parcelas cultivadas con coliflor en dos periodos de cultivo consecutivos, tomando como variable a analizar el error entre las salidas del modelo y

las medidas experimentales. Los métodos utilizados han sido, por un lado, el método LH-OAT, basado en el cálculo del promedio de índices de sensibilidad local evaluados en un conjunto de puntos del espacio de parámetros obtenidos por un muestreo según un hipercubo latino. El otro método evaluado ha sido el método FAST, que se basa en la descomposición de la varianza total de la salida del modelo al utilizar unas curvas de búsqueda en el espacio de parámetros.

Tras la determinación de los parámetros más importantes para la dinámica del agua y el ciclo del nitrógeno en el suelo, se ha procedido a la calibración de estos modelos. Con los modelos calibrados se ha realizado la predicción de la evolución de la humedad y del contenido de nitrato en el suelo.

Tanto el modelo LEACHM como el modelo EU-Rotate_N, una vez calibrados han simulado bien la evolución del contenido de agua en el suelo, tanto en el periodo utilizado para la calibración, como en las predicciones realizadas. Los parámetros relacionados con el ciclo del nitrógeno han presentado mayor grado de interacción, dificultando la elección de los parámetros más sensibles de cada modelo. Una vez obtenida una configuración óptima para el valor de los parámetros relacionados con el ciclo del nitrógeno se ha conseguido un ajuste razonable para el modelo, que permite predicciones de la evolución del nitrógeno con un margen de error superior que el que se ha conseguido para las predicciones de humedad del suelo.

Resum

Els models de simulació del transport d'aigua i nitrogen en el sòl són útils per a la comprensió del funcionament d'aquests processos a més de predir el comportament dels mateixos de manera que puguen utilitzar-se com a eines de recomanació per als agricultors quan s'apliquen en explotacions comercials. Aquest tipus de models es caracteritzen per contenir una gran quantitat de paràmetres associats als diferents processos que modelitzen. Alguns d'aquests paràmetres es poden obtenir directament d'experiments o de la literatura. No obstant açò, hi ha altres paràmetres que s'han d'estimar comparant les prediccions dels models amb dades experimentals que s'hagen mesurat en el camp. Aquest procés es coneix com a calibratge del model i s'ha de realitzar prèviament a poder utilitzar aquest tipus de models per a un cert cultiu i una explotació determinada.

Les mesures d'humitat i contingut de nitrogen en el sòl són difícils de realitzar ja que es necessita disposar d'equips especialitzats, com les sondes d'humitat, o bé realitzar mostrejos i anàlisis periòdiques que són costosos des del punt de vista econòmic, i a més requereixen temps per a la seua realització. Així, el nombre de dades disponible per al calibratge dels models de transport d'aigua i nitrogen no és molt elevat i, per açò, l'estimació de paràmetres d'aquests models presenta el problema conegut com sobreparametrització, açò és, es poden trobar diferents conjunts de paràmetres de manera que les prediccions del model passen pels punts experimentals disponibles. Per a resoldre aquest problema s'ha optat per reduir el nombre de paràmetres a estimar, fixant els altres paràmetres en un valor típic. Per a açò, és necessari disposar d'un criteri d'elecció de quins paràmetres s'utilitzen en el procés d'optimització associat al calibratge.

En aquest treball s'han avaluat dos mètodes d'anàlisi de sensibilitat global d'un model, per a determinar quins són els paràmetres més sensibles dels models LEACHN i EU-Rotate_N, que simulen el comportament de l'aigua i nitrogen en el sòl de dues parcel·les conreades amb coliflor en dos períodes de cultiu consecutius, prenent com a variable a analitzar l'error entre les eixides del model i les mesures experimentals. Els mètodes utilitzats han sigut, d'una banda, el mètode LH-OAT, basat en el càlcul de la mitja d'índexs de sensibilitat local avaluats en un conjunt

de punts de l'espai de paràmetres obtinguts per un mostreig segons un hipercub llatí. L'altre mètode avaluat ha sigut el mètode FAST, que es basa en la descomposició de la variància total de l'eixida del model en utilitzar unes corbes de cerca en l'espai de paràmetres.

Després de la determinació dels paràmetres més importants per a la dinàmica de l'aigua i el cicle del nitrogen en el sòl, s'ha procedit al calibratge d'aquests models. Amb els models calibrats s'ha realitzat la predicció de l'evolució de la humitat i del contingut de nitrat en el sòl.

Tant el model LEACHM com el model EU-Rotate_N, una vegada calibrats, han simulat bé l'evolució del contingut d'aigua en el sòl, tant en el període utilitzat per al calibratge, com en les prediccions realitzades. Els paràmetres relacionats amb el cicle del nitrogen han presentat major grau d'interacció, dificultant l'elecció dels paràmetres més sensibles de cada model. Una vegada obtinguda una configuració òptima per al valor dels paràmetres relacionats amb el cicle del nitrogen s'ha aconseguit un ajust raonable per al model, que permet prediccions de l'evolució del nitrogen amb un marge d'error superior que el que s'ha aconseguit per a les prediccions d'humitat del sòl.

Abstract

Water and nitrogen transport in soil simulation models are useful for understanding the evolution of such processes and to predict the behaviour of water and nitrogen in the soil to use such information to make recommendations to farmers when these models are applied to commercial farms. A feature of such models is that they have a large number of parameters associated to the different processes modelled. Some of these parameters can be obtained directly from experiments or literature. However, other parameters have to be estimated by comparing the model predictions with experimental data measured in the field. This process is known as model calibration and has to be previously performed to be able to use this type of models for a certain crop and a holding.

Measures of moisture and nitrogen content of soil nitrogen are difficult to obtain because either specialized equipment such as humidity probes is needed, or periodic sampling and analyses have to be undertaken, which are expensive from the point of view of the money and time needed. Thus, the number of data available for the calibration of water and nitrogen transport models is not very large therefore the parameter estimation of these models has the problem known as overparameterization. This means, it is possible to find different sets of parameter values for the model in such a way that the model predictions go through the available experimental data. To solve this problem, the chosen approach has been to reduce the number of parameters to be estimated, setting the other parameters in a typical value. For that, is necessary to have a criterion for choosing which parameters are used in the optimization process associated with calibration and which ones remain fixed.

In this work, we have evaluated two methods of global sensitivity analysis for computational models, to determine which are the most sensitive parameters of LEACHN and EU-Rotate_N models, which simulate the behaviour of water and nitrogen in the soil of two cultivated plots with cauliflower in two consecutive crops, taking as a variable to examine the error between the model outputs and experimental measurements. The methods used were, first, LH-OAT method based on the calculation of average Local sensitivity indices evaluated in a set of points

of the parameter space obtained by sampling according to a Latin hypercube. The other method evaluated has been the FAST method, which it is based on the decomposition of the total variance of the model when the parameters space is visited using search curves in this space.

After determination of the most important parameters related with the water dynamics in the soil and the nitrogen cycle, we have proceeded to the calibration of these models. With the calibrated models a prediction for the evolution of the moisture and nitrate content in the soil has been performed for the two experimental plots.

Once calibrated, both LEACHM and EU-Rotate_N models have simulated adequately the evolution of the water content in the soil, both in the period used for the calibration and in predictions performed. Parameters related to the nitrogen cycle have presented more interactions, hindering the choice of the most sensitive parameters of each model. After obtaining an optimal configuration for the value of the parameters related to the the nitrogen cycle, a reasonable adjustment for the models has been achieved providing predictions of the evolution of nitrogen content in the soils with a higher error margin than the one obtained for predictions of soil moisture.

Índice general

Índice general	IX
1 Introducción	1
1.1 Agricultura y Medio Ambiente	2
1.2 Abonado nitrogenado en cultivos hortícolas.	4
1.2.1 Época de aplicación y formas utilizadas	5
1.3 Cultivos de regadío.	6
1.4 Ciclo del nitrógeno y su balance en el suelo.	7
1.5 Modelos de simulación y la agricultura.	9
1.6 Objetivos y estructura.	12
1.6.1 Objetivo general	13
1.6.2 Objetivos específicos	13
2 Modelos de transporte de agua y nitrógeno en el suelo	15
2.1 Modelo LEACHN	15
2.1.1 Dinámica del agua	17
2.1.2 Transporte de solutos	19
2.1.3 Transformación y extracción del nitrógeno	20
2.1.4 Estructura y funcionamiento del modelo.	24
2.2 Modelo EU-Rotate_N	24
2.2.1 Dinámica del agua en EU-Rotate_N	27
2.2.2 Dinámica del nitrógeno y crecimiento del cultivo.	28

3	Metodología para la estimación de parámetros	33
3.1	Análisis de sensibilidad	35
3.1.1	Factores de entradas	37
3.1.2	Análisis de sensibilidad local (Un factor de entrada)	38
3.1.3	Análisis de sensibilidad global (Varios factores de entrada)	38
3.2	Método Latin Hypercube One-Factor At a Time (LH-OAT).	39
3.3	Fourier Amplitude Sensitivity Testing (FAST).	41
3.4	Método de optimización.	45
3.4.1	Método de Nelder y Mead	46
4	Calibración de los modelos en un cultivo de coliflor	53
4.1	Ensayos de fertilización nitrogenada en cultivo de coliflor	53
4.2	Calibración de los modelos de transporte de agua y nitrógeno en Paterna-1	60
4.2.1	Calibración de los parámetros hidráulicos	65
4.2.2	Calibración de los parámetros relacionados con la dinámica del nitrógeno en el suelo	85
4.3	Calibración de los modelos de transporte de agua y nitrógeno en Paterna-2	106
4.3.1	Calibración de los parámetros hidráulicos de los modelos	107
4.3.2	Calibración de los parámetros relacionados con la dinámica del nitrógeno .	115
4.4	Capacidad predictiva de los modelos calibrados	120
4.4.1	Predicción de la parcela Paterna-2	120
4.4.2	Predicción de la parcela Paterna-1	126
5	Conclusiones	133
	Bibliografía	135

Capítulo 1

Introducción

Las estadísticas de la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura (FAO), revelan que en los albores del nuevo milenio 2570 millones de personas dependen de la agricultura, la caza, la pesca o la silvicultura para su subsistencia, incluidas las que se dedican activamente a esas tareas y sus familiares a cargo sin trabajo, éstos representan el 42 % por ciento de la humanidad. La agricultura impulsa la economía de la mayoría de los países en desarrollo. En los países industrializados, tan sólo las exportaciones agrícolas ascendieron aproximadamente a 290000 millones de dólares EE.UU. en 2001. Históricamente, muy pocos países han experimentado un rápido crecimiento económico y una reducción de la pobreza que no hayan estado precedidos o acompañados del crecimiento agrícola.

En las estadísticas comerciales se considera la agricultura únicamente como una actividad económica, sin embargo, la agricultura como forma de vida, patrimonio, identidad cultural, pacto ancestral con la naturaleza, no tiene un valor monetario. Entre otras importantes contribuciones no monetarias de la agricultura cabe citar el hábitat y el paisaje, la conservación del suelo, la ordenación de las cuencas hidrográficas, la retención de carbono y la conservación de la biodiversidad. Pero quizás la aportación más significativa de la agricultura sea que, para más de 850 millones de personas subnutridas, la mayoría de ellas en las zonas rurales, constituye un medio para salir del hambre puesto que sólo cuentan con un acceso seguro a los alimentos si los producen ellos mismos ya que no tienen dinero para comprarlos. El sector que ofrece más posibilidades de ganar dinero en las zonas rurales es un sector floreciente de la alimentación y la agricultura [49].

La contaminación de las aguas subterráneas por nitratos de origen agrícola es uno de los problemas ambientales en zonas agrícolas de la Unión Europea y otros países desarrollados [42]. El nitrógeno es un nutriente fundamental en los sistemas agrícolas pero el manejo inadecuado de la fertilización y el riego, especialmente

en zonas de agricultura intensiva, puede provocar problemas ambientales como la lixiviación de nitrato y emisiones de óxidos de nitrógeno a la atmósfera [46]. En un informe la Agencia Europea del Medio Ambiente (EEA, 2007) dice que aunque la aplicación media de fertilizantes nitrogenados ha descendido en los últimos años, los nitratos provenientes de los abonos orgánicos y de los fertilizantes aún continúan contaminando las fuentes de agua potable y las zonas costeras y marinas. Se ha estimado que la agricultura consume alrededor del 50 % del agua potable disponible y que contribuye en un 50 % al aporte total de nitrógeno a los ríos de la Europa de los 15. La contaminación por nitrato de las aguas subterráneas también es un problema importante en muchas áreas de regadío en España, puesto que el agua subterránea proporciona el 27 % del agua utilizada en regadío y el 40 % del agua para el consumo humano. Por este motivo, esta agua no debe tener un contenido de nitrato superior al límite establecido en la legislación para las aguas potables, este límite es 50mgN/l . La contaminación de las aguas por nitrato afecta significativamente a la costa mediterránea y es especialmente intensa en la zona del Maresme donde sobrepasa los 500mgN/l y en áreas de las llanuras costeras del Júcar (Castellón y Valencia) donde son superiores a 100mgN/l . Otras zonas afectadas son las llanuras aluviales del Ebro, Guadalquivir y Guadalete con concentraciones en el rango de $50\text{mgN/l} - 100\text{mgN/l}$.

Para estudiar el problema que significa la contaminación por nitratos de origen agrícola y buscar alternativas de solución a dicho problema podemos auxiliarnos de los modelos matemáticos. Los modelos matemáticos tienen varias aplicaciones en diferentes ciencias. Dentro de las aplicaciones de los modelos matemáticos están: Comprender el funcionamiento de un sistema, simular experimentos antes de su realización y el estudio de situaciones que no pueden ser tratadas con experimentos [33]. Algunos de los parámetros en un modelo matemático pueden ser obtenidos a partir de experimentos o de la literatura, otros tienen que ser deducidos mediante la comparación de los resultados del modelo y los experimentos.

1.1 Agricultura y Medio Ambiente

La necesidad de un manejo adecuado del riego y de la fertilización nitrogenada para incrementar la eficiencia en el uso del nitrógeno en cultivos hortícolas deriva del problema que supone la contaminación de aguas subterráneas por nitratos de origen agrícola, recogida en el Real Decreto 261/1996, siendo el origen del mismo la directiva comunitaria 91/676/CEE de Protección de las aguas contra la contaminación producida por nitratos utilizados en la agricultura. Esta legislación trasladada a las Comunidades Autónomas ha supuesto la puesta en marcha de una serie de medidas para afrontar este problema, como son los códigos de buenas prácticas agrarias (CBPA) y los programas de actuación de obligado cumplimiento en las zonas declaradas como vulnerables a la contaminación por nitrato procedente

de fuentes agrarias. A nivel de la Comunidad Valenciana la legislación relativa a la contaminación por nitrato se resume en la Figura 1.1.

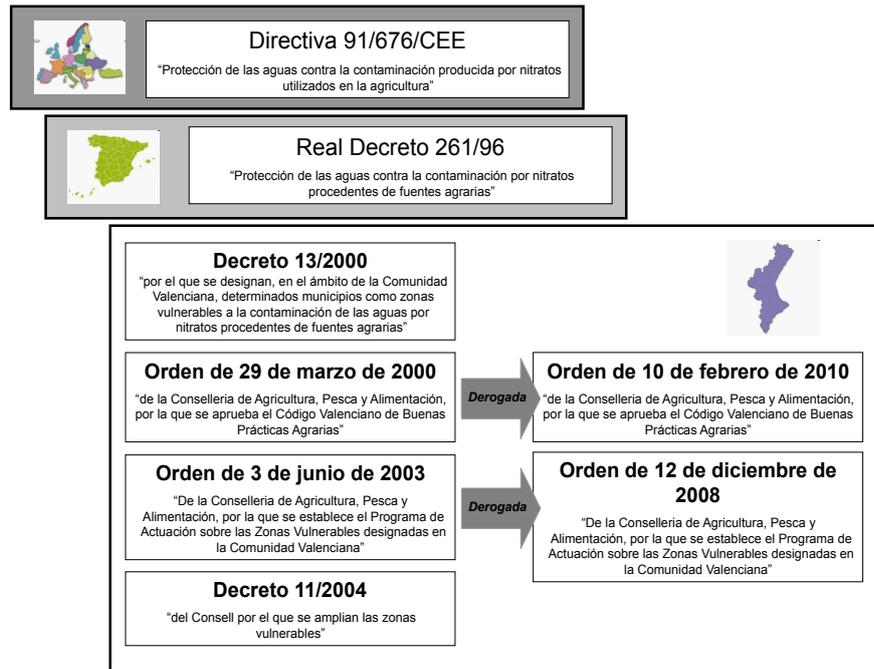


Figura 1.1: Esquema sobre la legislación relativa a la contaminación por nitrato de fuentes agrarias [15].

Para conseguir un uso eficiente del nitrógeno en cultivos hortícolas y leñosos intensivos es necesario optimizar, tanto el manejo del agua de riego, como el de la fertilización nitrogenada, ya que el proceso de lixiviación de nitrógeno está ligado al de drenaje de agua como se muestra en el esquema presentado en la Figura 1.2, [46], [2].

Es necesario, por tanto, generar información que contribuya a diseñar herramientas de manejo del riego y la fertilización en los sistemas agrícolas. En este sentido, los modelos de simulación pueden ser una opción muy útil para estimar con precisión las necesidades de riego y abonado nitrogenado en distintas condiciones. Además estos modelos pueden ser empleados para el análisis de diferentes escenarios y ayudar, de este modo, al establecimiento de políticas agro-ambientales.

En un estudio encargado por la UE a la empresa británica ADAS (antiguo organismo de extensión agraria inglés), sobre las buenas prácticas agrícolas para la reducción de la lixiviación de nitrato en la producción de frutas y hortalizas, se

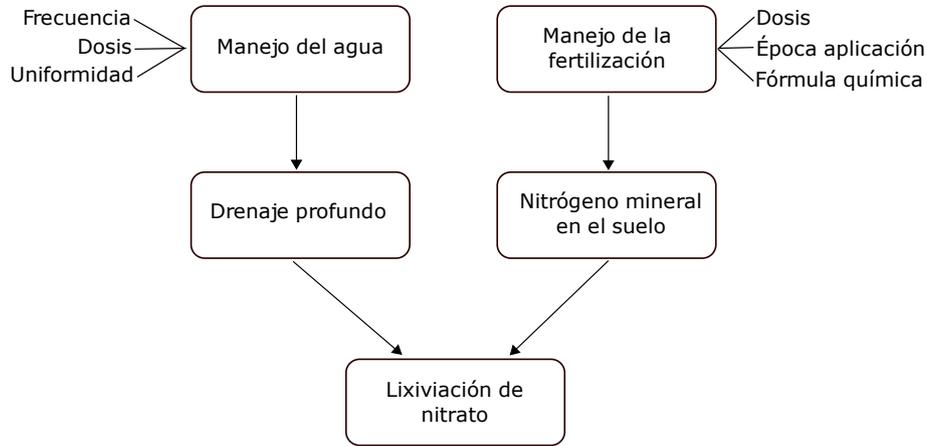


Figura 1.2: Influencia del riego y la fertilización en la lixiviación de nitrato.

subraya la necesidad del empleo de modelos de simulación para poder generar recomendaciones de manejo del nitrógeno en la multitud de combinaciones de cultivos, clima y prácticas de cultivo de la Unión Europea [38]. Sin embargo, también reconoce este estudio que, aunque estos sistemas son más flexibles que los ensayos de campo, el uso de modelos de simulación requiere de una calibración previa de los mismos en cada zona con características específicas de suelo y clima.

1.2 Abonado nitrogenado en cultivos hortícolas

Los requerimientos en elementos nutrientes de una plantación están relacionados con el tipo de planta y con el método de producción usado. A la hora de plantear una recomendación de abonado es necesario distinguir las extracciones de la planta y las necesidades de abonado, ya que en algunos casos como el del nitrógeno, procesos como la lixiviación, inmovilización o volatilización hacen que necesidades de abonado y extracciones no coincidan. Normalmente, se habla de extracción de nutrientes como la cantidad absorbida del suelo por la planta. La planificación del abonado requiere pues del conocimiento de la absorción de nutrientes a lo largo del ciclo de cultivo, que sigue una pauta similar a la del crecimiento, con una fase inicial lenta, seguida de una fase de absorción rápida en la que se produce la mayor acumulación de materia seca y de nutrientes en la planta. Las deficiencias de nutrientes producen una disminución en la producción y calidad de las cosechas y se manifiestan, cuando son más acusadas, en unos síntomas visuales. En concreto, la deficiencia de nitrógeno suele producir una disminución del crecimiento y un color más pálido o amarillento de las hojas. El cálculo de la dosis de nutrientes a aplicar en cada caso depende de las extracciones de cultivo, del contenido que haya

en el suelo y de la eficiencia de uso por el cultivo, que depende de aspectos como el sistema radicular, el manejo del abonado y de la eficiencia de riego. En el caso de la coliflor, las necesidades de nitrógeno son de $260 - 300\text{kgN/ha}$ para producciones comprendidas entre $25 - 35\text{t/ha}$. La mayoría de los sistemas de recomendación de abonado nitrogenado en los cultivos hortícolas se pueden agrupar en dos categorías básicas:

1. Aquellos que se basan en un análisis de N mineral al inicio del cultivo antes de que el crecimiento de la planta sea más rápido.
2. Aquellos que se basan en medidas en las plantas que indican su estado nutritivo en determinados momentos de su desarrollo.

1.2.1 Época de aplicación y formas utilizadas

Es práctica habitual fraccionar el abonado para aumentar la eficiencia de uso del fertilizante acompañando mejor el suministro del nutriente con su absorción por el cultivo. En el caso del riego tradicional (por surcos o por inundación), típico de la huerta de Valencia, la distribución temporal debe ser aproximadamente de un $20 - 40\%$ del total para el abonado de fondo y de un $60 - 80\%$ del total para el abonado de cobertura, este último repartido en una o varias aplicaciones, dependiendo de la duración del cultivo, evitando aplicarlo en la última parte del ciclo de cultivo. Los nutrientes se pueden aportar en forma mineral (fertilizantes minerales) o en forma orgánica (estiércol, purín, compost, etc.). Dentro de los fertilizantes minerales las diferentes formas químicas de nitrógeno son, básicamente, la amoniacal, la nítrica y la ureica. Cuando se emplea riego tradicional, en el abonado de fondo se debe utilizar la forma ureica o amoniacal, porque están menos expuestas a la lixiviación, mientras que en los abonados de cobertura se recomienda emplear cualquiera de ellas, preferentemente las formas nítricas o nítrico-amoniacaes. En cuanto a enmiendas orgánicas, es recomendable aplicar productos orgánicos estabilizados e higienizados mediante un proceso de compostaje o similar, con la finalidad de reducir los posibles riesgos derivados de la aplicación de las materias orgánicas crudas, como la inmovilización del nitrógeno, la liberación de compuestos fitotóxicos, la presencia de microorganismos patógenos, semillas de malas hierbas, etc. Asimismo, las enmiendas y los abonos orgánicos deben presentar unos contenidos de metales pesados inferiores a los máximos admisibles por las normativas vigentes.

1.3 Cultivos de regadío

El agua de riego es uno de los elementos fundamentales en cualquier cultivo, especialmente en cultivos hortícolas. Un balance hídrico inadecuado puede ocasionar mermas en el rendimiento y calidad del cultivo favoreciendo la proliferación de plagas y enfermedades en las plantas. Por otra parte, el exceso de agua de riego aumenta los costes de producción debido al coste del agua y las pérdidas por lavado de fertilizante y productos fitosanitarios. Además, puede ocasionar enfermedades que reduzcan el rendimiento y calidad comercial de la cosecha. Por ello, la optimización del riego debe ser una prioridad en cualquier explotación agrícola.

Las parcelas de regadío se tipifican en función de la modalidad del sistema de riego de acuerdo con la siguiente clasificación:

Riego por superficie o gravedad. Se caracteriza por el reparto del agua en la superficie de la parcela aprovechando la fuerza de la gravedad. Son modalidades de este tipo de riego el riego a manta, en surcos, alcorques, etc.

Riego por aspersión. Se caracteriza por la distribución del agua mediante tuberías a alta presión hasta los mecanismos de aspersión. Este sistema de distribución suele ser de carácter fijo, siendo, generalmente, completo el recubrimiento de la parcela, o portátil, efectuándose el riego de la parcela por sectores.

Riego de tipo automotriz. Se caracteriza por la distribución del agua mediante tuberías a alta presión hasta los mecanismos de aspersión se desplazan de forma autónoma. Se incluyen en esta modalidad los sistemas basados en mecanismos tipo pivot y automotrices. La diferencia con el tipo fijo radica en la movilidad del aspersor.

Riego localizado. Puede ser por goteo, en este caso el agua se distribuye en el suelo a través de orificios emisores o goteros. Suele tener un carácter fijo, pudiendo estar enterrado el sistema principal de distribución. Se incluye en este tipo la micro aspersión y similares.

Para los cultivos de hortalizas se utiliza fundamentalmente el sistema de riego localizado, (en un 56,99 por ciento de su superficie, en la que se incluyen los invernaderos). No obstante, en la zona de Valencia este tipo de cultivos se riega utilizando un sistema de riego por gravedad utilizando surcos. En este tipo de riego, la eficiencia del mismo es baja y el agricultor suele aplicar el agua utilizando la periodicidad del turno de riego y no teniendo en cuenta las necesidades de agua del cultivo.

1.4 Ciclo del nitrógeno y su balance en el suelo

El nitrógeno es un elemento imprescindible en la producción agrícola [51]. Desempeña funciones esenciales como componente de la clorofila y de las moléculas proteicas. En la naturaleza el nitrógeno se encuentra en distintos estados químicos y va pasando de una forma a otra en su tránsito por el sistema suelo-planta, estando sujeto a una serie de transformaciones y procesos de transporte que constituyen lo que se denomina como *ciclo del nitrógeno*. Este ciclo, junto con el del carbono, es uno de los ciclos bioquímicos más importantes en el mantenimiento de la vida vegetal y animal. Sin embargo, la dinámica y transformaciones del nitrógeno en el suelo dan lugar a la formación de compuestos solubles como el nitrato o gaseosos, como los óxidos de nitrógeno, que pueden originar problemas ambientales.

El ciclo del nitrógeno presenta unas entradas de nitrógeno al suelo, constituidas por los aportes fertilizantes orgánicos e inorgánicos, los aportes en el agua de lluvia y riego, la fijación biológica y la deposición húmeda. Por otra parte, las salidas de nitrógeno del suelo vienen determinadas por la extracción por la planta, la volatilización, la desnitrificación, la lixiviación y la escorrentía. El ciclo se completa con una serie de transformaciones en el suelo como la mineralización del nitrógeno orgánico, la nitrificación del amonio y la inmovilización.

La *mineralización* es el paso de nitrógeno orgánico a nitrógeno mineral como forma amónica (NH_4^+). Este proceso de transformación biológica del nitrógeno orgánico se lleva a cabo mediante la acción de los microorganismos del suelo. Esta es la primera transformación que sufre el nitrógeno orgánico y depende de factores tales como la calidad del sustrato orgánico (relación C/N), la humedad, la temperatura del suelo y la propia actividad biológica del suelo.

La *nitrificación* es el proceso por el cual el ión amonio (NH_4^+) es oxidado primero a nitrito (NO_2^-) por bacterias aerobias del género *Nitrosomonas* y posteriormente a nitrato (NO_3^-) por las del género *Nitrobacter*. Debido a que la nitrificación es bastante más rápida que la amonificación, se emplea el término mineralización para indicar el proceso global de conversión de nitrógeno orgánico a nitrógeno mineral, fundamentalmente nitrato y amonio. El nitrógeno en su forma nítrica es extremadamente soluble en agua, no es retenido por la matriz del suelo debido a su carga negativa y, por debajo del sistema radicular, prácticamente no sufre transformaciones químicas ni biológicas, por lo que puede ser fácilmente lavado por el agua de drenaje que percola hacia las capas más profundas del suelo fuera del alcance de las raíces. Una vez se ha llegado a la forma nítrica, se ha cerrado el ciclo principal, ya que es en este estado en el que es aprovechable mayoritariamente por la planta.

La evolución del nitrógeno en el suelo pasando del estado orgánico al mineral no se produce en un sentido único. En ciertas condiciones el nitrógeno mineral vuelve a transformarse en orgánico, siguiendo un proceso inverso al de la nitrificación,

este proceso se denomina *inmovilización*. Mediante este proceso numerosos microorganismos que utilizan el nitrógeno mineral del suelo para la síntesis de sus propias proteínas, compiten directamente con las plantas cultivadas. Se trata de una inmovilización temporal que se produce especialmente durante el proceso de descomposición y que limita el posible lavado del nitrato. Como la mineralización y la inmovilización son procesos contrarios, es decir, actúan en sentidos opuestos, su balance se denomina mineralización neta (aquella de la que la planta puede beneficiarse).

La *extracción* de nitrógeno por la planta constituye una de las salidas más importantes del nitrógeno en los suelos agrícolas. La planta extrae el nitrógeno del suelo por medio de sus raíces en estado mineral, nítrico o amoniacal. El nitrógeno se absorbe principalmente en forma nítrica, la cual sirve de partida a la planta para la síntesis de proteínas en sus tejidos. Sin embargo, en las primeras fases de su vida las plantas muestran preferencia por el nitrógeno amoniacal, que utilizan más rápidamente en la síntesis de proteínas que el nitrógeno nítrico. La extracción depende de las necesidades de la planta y de la disponibilidad del nitrógeno del suelo.

La *desnitrificación* es la conversión del nitrato y nitrito a formas gaseosas como N_2 o N_2O , que pasan a la atmósfera. Este proceso es debido a que, en condiciones de elevada humedad en el suelo, la escasez de oxígeno obliga a ciertos microorganismos a emplear el nitrato y el nitrito como sustrato respiratorio y fuente de oxígeno.

La *volatilización* es la emisión de amoníaco gaseoso desde el suelo a la atmósfera. Ello es debido al desplazamiento que se produce en el equilibrio existente entre el amonio y el amoníaco en la solución de suelo. Ocurre en condiciones de pH alcalino, y provoca que el amonio del suelo se transforme en amoníaco, que es un gas volátil.

La *escorrentía* hace referencia a las pérdidas de nitrógeno que se producen con el flujo superficial de agua que se origina como consecuencia del riego o una lluvia intensa. Éstas suelen ser pequeñas en el caso de parcelas agrícolas niveladas o con poca pendiente.

La *lixiviación* se refiere al transporte de nitrógeno, en forma de nitrato, hacia capas más profundas del suelo, con el agua que se va desplazando por el espacio poroso del suelo. Está determinada por la percolación profunda, o cantidad de drenaje, y la concentración de nitrato en la solución de suelo que se desplaza.

Considerando un volumen de suelo determinado, se establece un balance de masa en el sistema contabilizando las entradas y salidas de nitrógeno en el suelo así como la capacidad del suelo de almacenar nitrógeno en sus diferentes formas (orgánico y mineral). Los balances de nitrógeno en cultivos hortícolas se llevan a cabo en los en la zona radicular, que comprende normalmente los primeros 60 centímetros de

suelo. Este balance permite aproximarse a las necesidades de abonado nitrogenado del cultivo, teniendo en cuenta que para que no disminuya la producción por falta de N en el suelo, es necesario que el contenido de N mineral en el suelo al final del periodo de cultivo no sea inferior a un valor mínimo, pasando a ser éste un requisito del balance.

El principal inconveniente de utilizar el balance de nitrógeno como sistema de cálculo de las necesidades del cultivo es la dificultad de conocer algunos términos del balance, siendo más sencillo aplicar un balance simplificado que tiene en cuenta sólo los términos más importantes. En este caso se considerarían la extracción por la planta y el contenido mínimo de nitrógeno mineral en el perfil de suelo al final del cultivo, como salidas, y como entradas los aportes por residuos de cosecha, el contenido de nitrógeno mineral al inicio del cultivo, la mineralización de la materia orgánica y de las enmiendas orgánicas (si las hay), y el aporte del agua de riego.

1.5 Modelos de simulación y la agricultura

Los modelos de simulación relacionados con los procesos agrícolas y ambientales se han implementado en las últimas décadas. Esto obedece a que en diferentes situaciones es más fácil trabajar con los modelos que con los sistemas reales, ya sea porque el sistema es demasiado grande y complejo, por limitación de recursos humanos y económicos, o por la imposibilidad de experimentar en dichos sistemas. La simulación es una herramienta que permite hacer una evaluación rápida y barata sobre el comportamiento de un sistema agrícola en un periodo de tiempo.

Los modelos en agricultura se han usado desde hace 50 años; inicialmente para evaluar procesos individuales, como evapotranspiración, propiedades hidráulicas del suelo, crecimiento de las plantas o cultivos y el contenido de nutrientes del suelo en los años 60's. Posteriormente, en los años 80's, para evaluar sistemas de pastoreo, movilización de nutrientes en sistemas de cultivo, erosión y productividad del suelo, crecimiento de cultivos anuales, producción de cultivos, contaminación de agua, ciclos de nutrientes y la dinámica de la materia orgánica en suelos. Finalmente, a partir de los años 90's aparecen modelos que bajo el enfoque de agro-ecosistemas integran los componentes del sistema de manera multidisciplinar, para evaluar el impacto de la política agrícola sobre la degradación del suelo, impacto ambiental y rentabilidad económica de sistemas agrícolas alternativos, el impacto de la economía y política regional sobre la agricultura, efecto de políticas de manejo sobre emisiones de minerales en agricultura y la evaluación de pesticidas y fertilizantes sobre el suelo y el clima. En particular se han modelado los factores que intervienen en el cambio de uso de suelo, con prácticas agrícolas como componente principal, desde una visión espacial, económica, socio-económico y política.

Para lograr un uso eficiente de agua y nitrógeno en sistemas de cultivos, es necesario mejorar la gestión del riego y la fertilización a base de nitrógeno. Los modelos de simulación por ordenador pueden ayudar en esta mejora ya que integran los diferentes procesos que afectan la dinámica de agua y nitrógeno en el sistema suelo-planta. Estos modelos después de su calibración, permiten estimar la lixiviación de nitratos, nitrógeno mineral del suelo y el contenido de agua de los diferentes cultivos en diferentes condiciones de riego, lluvia y fertilización, siendo una técnica barata y rápida para evaluar los efectos de las diversas prácticas de manejo agrícola sobre la lixiviación de nitratos.

Existe una gran variedad de modelos para describir la dinámica del agua y el nitrógeno en los cultivos. Las diferencias en la forma de plantear y resolver las ecuaciones asociadas a los diferentes procesos simulados conducen a distintos tipos de modelos. Así, los modelos simples o empíricos se basan en ecuaciones efectivas para los distintos procesos, mientras que los modelos mecanicistas desarrollan ecuaciones más detalladas y complejas basadas en la Física de los procesos. También se pueden clasificar los modelos como deterministas o estocásticos. Los primeros para un conjunto de parámetros del modelo producen un único resultado, mientras que los modelos estocásticos contemplan la posibilidad que ciertos parámetros del modelo sean variables estocásticas, dando como resultado una serie de variables aleatorias que se distribuyen con una cierta distribución estadística.

Existen numerosos modelos para simular la dinámica del agua en el suelo de sistemas de cultivo. Este tipo de modelos se pueden utilizar para mejorar el riego de los cultivos atendiendo a una estimación de las necesidades de agua de las plantas en el periodo de cultivo. Generalmente, se utilizan modelos simples, denominados modelos de capacidad (tipping bucket), que asumen que el suelo actúa como un almacén de agua con una capacidad de almacenamiento limitada y que la evapotranspiración varía con el contenido de agua en el suelo [70], [22], [36]. Ejemplos de estos modelos son NLEAP [14], CropSyst [71], STICS [4] y EU-ROTATE_N [54].

Otros modelos son más mecanicistas y asumen que el transporte de agua sigue la ecuación de Richards [75], [80], como es el caso de LEACHM [23] y Hydrus-2D [67], o la ecuación de Green-Ampt, como en el caso de los códigos DRAINMOD-N [81] y RZWQM [72].

Los modelos de capacidad se caracterizan por tener un número reducido de parámetros y proporcionar una respuesta rápida [10]. Mientras que los modelos mecanicistas basados en la ecuación de Richards requieren del conocimiento de la relación existente entre la humedad volumétrica, el potencial matricial y la conductividad hidráulica del suelo. Estas relaciones complejas se suelen abordar de forma indirecta a través del conocimiento de otras propiedades del suelo como la textura, materia orgánica, densidad aparente, etc. (funciones de edafotransferen-

cia) o con medidas directas de estas propiedades. Por ello, este tipo de modelos son complejos y costosos de utilizar [37].

En [7] se recoge una comparación entre distintos modelos de simulación para describir la dinámica del nitrógeno en sistemas de cultivo. Las diferencias entre los distintos modelos se encuentran fundamentalmente en el grado de detalle de la descripción de los procesos simulados. Los procesos que, generalmente, se tienen en cuenta son la mineralización, la lixiviación, la extracción por el cultivo, la nitrificación y desnitrificación, volatilización y la fijación simbiótica del nitrógeno. La mayoría de los modelos no contemplan todos estos procesos y se centran en algunos de ellos.

Hay modelos generalistas que contemplan, con diferentes aproximaciones, la mayoría de estos procesos, como son el LEACHM, el EU-ROTATE_N, CropSyst, el RZWQM y el NLEAP, que se han utilizado para la simulación de distintos tipos de cultivos. Hay otros modelos especializados en simular el crecimiento y producción del cultivo como SUCROS [26]. Este último modelo no simula el balance de nitrógeno pero utiliza una función de estrés para simular la extracción de nitrógeno por la planta. Otros modelos como LIXIM [39], se han especializado en simular el nitrógeno lixiviado y la mineralización. Otros están especializados en la emisiones gaseosas de nitrógeno y en la volatilización de amonio. Ejemplos de este tipo de modelos son el NOE [21] y el VOLT'AIR [34].

La mayoría de modelos trabajan a escala de parcela o cultivo, aunque hay modelos que pueden ser aplicados a escala de cuenca como SWAT [64] o NELAP GIS [13]. En general, las simulaciones se realizan a escala diaria, aunque hay modelos cuyas salidas se dan para el conjunto del periodo de cultivo.

Los modelos de simulación de la dinámica del agua y el nitrógeno en el suelo tienen un gran número de parámetros de entrada. Algunos de estos parámetros son conocidos, bien sea de medidas experimentales o bien de la literatura en donde se describen los modelos. Pero otros parámetros son desconocidos o llevan asociados una cierta incertidumbre y hay que determinarlos a partir de medidas de magnitudes de salida de los modelos. Este proceso se conoce como *calibración del modelo* o la *estimación de parámetros* del modelo. Una vez determinados todos los parámetros de entrada del modelo, se pueden comparar las salidas del mismo con los datos experimentales usados en la calibración o bien con datos nuevos para evaluar la capacidad predictiva del mismo.

En la estimación de parámetros a partir de medidas experimentales constituye un problema inverso que presenta ciertas dificultades [3]. Se requiere un método robusto y rápido para resolver las ecuaciones que definen el modelo ya que va a ser necesario evaluar el modelo numerosas veces. Además se utilizarán valores de los parámetros en todo el rango de variación de los mismos, con lo que el comportamiento del modelo puede ser bastante diferente de unos valores a otros. Para la

estimación de parámetros de los modelos se supone que los datos experimentales están libres de error y, partiendo de un valor inicial para los parámetros que se quieren estimar, se inicia un proceso de optimización que busca el mínimo de una determinada función de error. Los métodos de optimización globales para la función error son muy costosos desde el punto de vista computacional y, por ello, se suelen utilizar métodos de optimización locales, con lo que se consigue un mínimo local del error.

Para la calibración de parámetros de un modelo se debería disponer de un número suficiente de medidas experimentales de todas las variables que proporciona el modelo como salida. En el caso de la utilización de los modelos de simulación de la dinámica del agua y el nitrógeno en el suelo para el estudio de plantaciones, se suele disponer de un número limitado de medidas ya que éstas son difíciles de obtener o tienen un coste económico elevado. Por ello, la estimación de parámetros de estos modelos presenta el problema conocido como sobreparametrización, esto es se pueden encontrar distintos conjuntos de parámetros de forma que las predicciones del modelo pasen por los puntos experimentales disponibles.

Para resolver el problema de la sobreparametrización se han propuesto distintas alternativas [77], como el uso de una regularización de Tikhonov que añade una serie de ligaduras al problema que permite reducir el espacio de búsqueda de los parámetros y eliminar el efecto de los errores en las medidas. En este trabajo se ha optado por el uso de métodos de análisis de sensibilidad de modelos computacionales [58], [73] para identificar aquellos parámetros que tienen más influencia en la salida de los modelos de forma que sea posible reducir el número de parámetros necesarios para calibrar el modelo y reducir la posible sobreparametrización de los modelos.

1.6 Objetivos y estructura

En el trabajo a desarrollar se considerarán dos modelos de simulación de la dinámica del agua y el nitrógeno en el suelo de carácter general como son el LEACHM [23] y el EU-ROTATE_N [54], y se desarrollará una metodología de estimación de parámetros de dichos modelos basada en un análisis de sensibilidad previo de los modelos que nos permita seleccionar aquellos parámetros más influyentes en la salida de los modelos que se compara con los datos experimentales disponibles. Para realizar el análisis de sensibilidad se utilizarán dos métodos de análisis, el método *Latin Hypercube-One Factor at a Time* (LH-OAT) [30] y el método *Fourier Amplitude Sensitivity Test* (FAST) [12], [11], [6].

Una vez seleccionados, los parámetros más importantes son los que se utilizarán en el proceso de calibrado del modelo. Los datos utilizados para calibrar los dos modelos se han obtenido de un experimento llevado a cabo en dos plantaciones comerciales de coliflor en Paterna (Valencia), la primera de septiembre de 2012 a

febrero de 2013, y la segunda de septiembre de 2013 a febrero de 2014. Una vez calibrados los dos modelos, se han comparado las capacidades predictivas de los dos modelos, utilizando los datos de una plantación para el calibrado y los datos de la otra para evaluar la predicción, tanto de la humedad del suelo como del contenido de nitrato en el mismo.

Lo que resta del trabajo se ha estructurado del siguiente modo. En el capítulo siguiente se describen los modelos LEACHN y EU-ROTATE_N, describiendo los procesos que tienen en cuenta y los principales parámetros de entrada de los modelos. Posteriormente, se presentan los métodos de análisis de sensibilidad de modelos computacionales, así como el método de optimización que se han utilizado en la calibración de los modelos. A continuación, se presentan los resultados obtenidos para la calibración de los modelos LEACHN y EU-ROTATE_N utilizando los datos obtenidos en las plantaciones de coliflor, así como los resultados que predicen los dos modelos una vez calibrados comparando el funcionamiento de los dos modelos en el cultivo de coliflor estudiado. Por último, se presentan las principales conclusiones del trabajo así como los posibles trabajos que se pueden llevar a cabo en un futuro.

1.6.1 Objetivo general

Obtener una metodología de estimación de parámetros que pueda ser aplicable a los modelos de simulación de interés agronómico LEACHN y EU-Rotate_N.

1.6.2 Objetivos específicos

1. Analizar la sensibilidad de los parámetros en los modelos LEACHN y EU-Rotate_N.
2. Estudiar el funcionamiento de distintos algoritmos de búsqueda, tanto local como global, para la determinación de los parámetros de ambos modelos.
3. Aplicar distintos índices para la determinación de la calidad de los parámetros obtenidos.
4. Determinar los valores de los parámetros en los modelos LEACHN y EU-Rotate_N en distintos experimentos.
5. Utilizar los modelos LEACHN y EU-Rotate_N una vez calibrados como sistemas de recomendación de abonado nitrogenado y de evaluación de escenarios relacionados con la lixiviación de nitrato.

Capítulo 2

Modelos de transporte de agua y nitrógeno en el suelo

Los modelos matemáticos son aceptados científicamente como herramientas con la posibilidad de describir sistemas mas allá de la subjetividad humana. En la actualidad existe gran interés en la comunidad agrícola en el uso de modelos matemáticos para optimizar la aplicación de agua y fertilizantes en suelos de cultivos y para predecir el destino de éstos una vez aplicados.

En este trabajo nos centraremos en dos códigos de uso general para el estudio de la dinámica del agua y el nitrógeno en el suelo en sistemas de cultivo, como son el LEACHN [23], [25] y el modelo EU-Rotate_N [5], [52], que se describen a continuación.

2.1 Modelo LEACHN

LEACHN es el módulo del nitrógeno del modelo general denominado LEACHM (Leaching Estimation And Chemistry Model), y que describe el régimen de agua y solutos en la zona radicular del suelo. Fue desarrollado por John Hutson y Jeff Wagenet en el Departamento de Ciencias Atmosféricas Suelo y Cultivo de la Universidad de Cornell. Desde 1984 el código ha ido evolucionando en respuesta a los requerimientos y experiencia de los usuarios, siendo la última versión del año 2003, que es la versión que se ha utilizado en este trabajo.

LEACHM es un modelo unidimensional que simula la dinámica de agua y solutos y relaciona los procesos biológicos y químicos en suelos no saturados o parcialmente saturados [23]. LEACHM ha sido ampliamente utilizado en diferentes cultivos

anuales y diferentes solutos como nitratos y pesticidas, [27], [76], así como para cultivos leñosos [20], [37].

El modelo LEACHM consta, en la versión utilizada, de cuatro módulos independientes:

1. LEACHN, que simula el transporte y las transformaciones del nitrógeno y del fósforo.
2. LEACHP, que simula el transporte y la degradación de pesticidas.
3. LEACHC, que simula el movimiento transitorio de iones inorgánicos.
4. LEACHB, que simula el crecimiento y la dinámica de poblaciones microbianas.

En la Figura 2.1 se muestran, de forma esquemática los principales procesos asociados a la dinámica del agua y solutos en el suelo descritos por el código LEACHM, aunque en este trabajo nos centraremos en el módulo LEACHN.

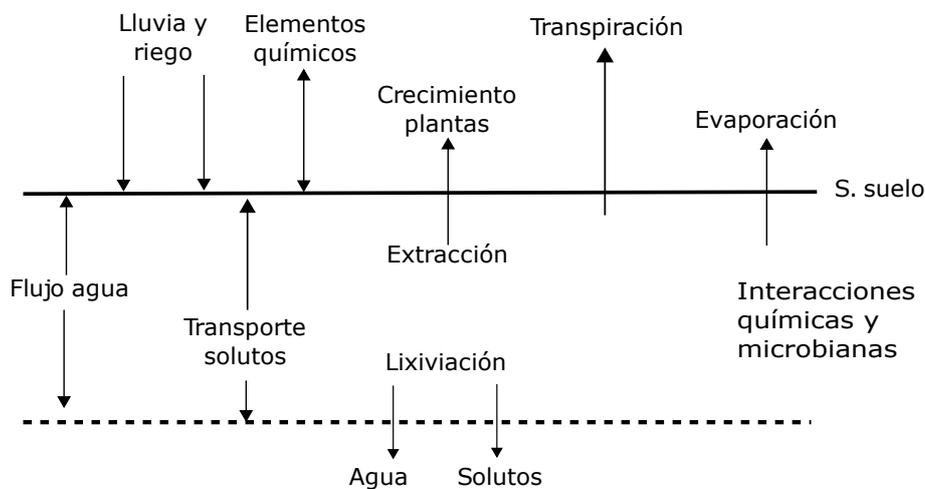


Figura 2.1: Principales procesos descritos por el módulo de LEACHN [25]

2.1.1 Dinámica del agua

En el módulo del agua se tienen en cuenta los procesos:

- Evapotranspiración. Ésta se mide teniendo en cuenta el contenido de agua en el suelo, la resistencia y la densidad de la raíz.
- Flujo de Agua. Se estudia mediante la ecuación de Richard's, considerando las relaciones funcionales entre el contenido de agua, potencial matricial y conductividad hidráulica, en base a la ecuación de Campbell.
- Escorrentía. Función de la capacidad máxima de infiltración de agua en el suelo y la tasa de aplicación de agua.

La subrutina de evapotranspiración está basada en los métodos de Childs y Hanks [8]. A partir de datos semanales de evaporación de tanque, coeficiente del tanque evaporímetro K_p y coeficiente del cultivo K_c , se calcula diariamente la evapotranspiración. Durante el día se supone que la evapotranspiración ET_p comienza a las 7:15 (fracción 0.3 del día) y termina a las 19:15 (fracción 0.8 del día) y que su evolución a lo largo de un día es de tipo sinusoidal, siguiendo la ecuación,

$$ET_p = ET_{\max} \sin(2\pi t - 0.3) , \quad (2.1)$$

donde ET_{\max} es la evapotranspiración máxima en el ciclo diario que se supone que ocurre cuando $t = 0.55$ día (3 p.m.). El programa calcula la evapotranspiración para cada incremento de tiempo (Δt) a partir de la expresión (2.1). La tasa de absorción de agua por las raíces se estima siguiendo el método propuesto por Nimah y Hanks [48], según la expresión,

$$U = (H_{\text{root}} + z(1 + R_c) - h - s) \left(\frac{RDF K}{\Delta x \Delta z} \right) , \quad (2.2)$$

donde U es el término de transpiración (d^{-1}), H_{root} es el potencial de agua en la raíz a la altura de la superficie del suelo, $1 + R_c$ es un término de resistencia radicular, R_c es un coeficiente de flujo específico del sistema radicular de la planta, h el potencial matricial del agua en el suelo (mm), s es el potencial osmótico (mm), RDF es la fracción de raíces activas, K es la conductividad hidráulica ($mm d^{-1}$), z es la profundidad (mm), y x es la distancia de la raíz al punto del suelo donde se mide el potencial mátrico y osmótico. Mediante un procedimiento iterativo se obtiene un valor de H_{root} que permite una extracción de agua igual a la transpiración potencial, con las restricciones de no permitir el flujo de agua de la raíz al suelo, que el valor de H_{root} esté comprendido entre 0 y el límite inferior establecido (normalmente $-3000 kPa$) y que no puede haber pérdidas por transpiración para contenidos de agua del suelo correspondientes a $-1500 kPa$.

Todo ello asegura que cuando el suelo se seca la transpiración sea menor que la potencial.

El flujo de agua en el suelo se calcula utilizando la ecuación de Richard en suelos insaturados. Esta ecuación de flujo vertical transitorio se deriva de la combinación de la ley de Darcy y de la ecuación de la continuidad. Considerando el flujo macroscópico, en condiciones de equilibrio se cumple la ley de Darcy,

$$q = -K(\theta) \frac{\partial H}{\partial z}. \quad (2.3)$$

donde q es el flujo o volumen de agua que circula a través de una superficie por unidad de tiempo ($cm^3 cm^{-2} dia^{-1}$), $K(\theta)$ es la conductividad hidráulica para una humedad θ ($cm^3 cm^{-3}$), expresada en ($cm dia^{-1}$), H es el potencial hidráulico del agua en el suelo (cm) y z es la profundidad (cm).

La ley de Darcy describe el flujo horizontal en dirección horizontal de un fluido a través de un medio poroso y es válida para régimen estacionario. Para el régimen no estacionario es necesario emplear la ecuación de continuidad unidimensional,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\frac{\partial q}{\partial z}. \quad (2.4)$$

La combinación de la ecuación de Darcy y la ecuación de continuidad conduce a la ecuación de Richard para flujo en dirección vertical,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\theta) \frac{\partial H}{\partial z} \right) - U(z, t). \quad (2.5)$$

Empleando la capacidad específica del medio no saturado $C(\theta)$ tendremos que

$$C(\theta) = \frac{\partial \theta}{\partial h}, \quad (2.6)$$

la ecuación (2.5) se puede transformar dejando como única variable dependiente el potencial hidráulico,

$$\frac{\partial h}{\partial t} C(\theta) = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\theta) \frac{\partial H}{\partial z} \right) - U(z, t). \quad (2.7)$$

Para poder resolver la ecuación se necesitan datos sobre las características hidráulicas del suelo (relaciones entre conductividad hidráulica K , humedad volumétrica θ y potencial mátrico h), las condiciones iniciales o de contorno y las entradas y salidas de agua (riego, lluvia y evapotranspiración) a lo largo del período simulado. Las relaciones funcionales entre la conductividad hidráulica, humedad volumétrica

y potencial mátrico están basadas en la formulación de Campbell [23]. La ecuación de retentividad presenta la forma,

$$h = a \left(\frac{\theta}{\theta_s} \right)^{-b}, \quad (2.8)$$

donde θ_s es la humedad volumétrica a saturación y a y b son constantes.

Aplicando un modelo de capilaridad a la ecuación de retención de agua de Campbell se tiene la ecuación de conductividad hidráulica,

$$K = K_s \left(\frac{\theta}{\theta_s} \right)^2 b + 2 + p, \quad (2.9)$$

donde K_s es la conductividad hidráulica saturada ($mm\ dia^{-1}$), p es un parámetro de interacción del tamaño de poro, que en la versión utilizada el valor es de 1 y b es la constante de la ecuación de retentividad.

El proceso de escorrentia en el modelo LEACHN se calcula de acuerdo con las características hidráulicas del perfil del suelo y el método del número de curva [78]. En el cultivo que se ha estudiado, las parcelas están niveladas con pendiente cero y este proceso no se tiene en cuenta.

2.1.2 Transporte de solutos

Una vez que se han estimado los flujos de agua, los correspondientes flujos químicos se pueden estimar usando una solución numérica de la ecuación de convección-dispersión (CDE), teniendo en cuenta la absorción simultánea, las fuentes y los sumideros de solutos [23].

La ecuación de convección-dispersión en LEACHM expresa como,

$$\frac{\partial(\theta c)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho s)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D(\theta, q) \frac{\partial c}{\partial z} - qc \right) - U(z, t) \pm \Phi(z, t), \quad (2.10)$$

donde c es la concentración total de solutos en fase líquida, s es la concentración de la fase adsorbida, ρ es la densidad aparente, $D(\theta, q)$ es el coeficiente de dispersión efectiva, que incluye la dispersión mecánica y la difusión química, q es la densidad de flujo de agua, $U(z, t)$ es la extracción de nitrógeno por la planta y Φ es un término que contabiliza las ganancias o pérdidas debidas a las transformaciones del nitrógeno en el suelo. El componente de difusión química de la dispersión efectiva, depende de dos constantes empíricas m y n .

LEACHM considera el movimiento de agua y el transporte de solutos a través de la matriz del suelo. Aunque tiene la opción de utilizar un modelo de capacidad de agua móvil e inmóvil en el suelo para describir el movimiento de agua, simplificando

de este modo el proceso de transporte, el modelo está desarrollado para describir el flujo unidimensional de agua en la zona no saturada mediante la ecuación de Richard y el transporte de solutos mediante la ecuación de convección-dispersión (CDE), resolviendo ambas utilizando técnicas en diferencias finitas. Para ello, el perfil se divide en segmentos horizontales y el período de tiempo en pequeños intervalos (como mínimo de 0.1 días). Se supone una malla unidimensional vertical en la que los nodos son equidistantes centrados en las celdas. El nodo superior es ($i = 1$) y el inferior ($i = k$) están fuera del perfil del suelo y se usan para mantener las condiciones de contorno deseadas (Vease la Figura 2.2).

Se plantean las ecuaciones en diferencias finitas para un nodo genérico suponiendo una interpolación lineal para valores intermedios. Estas ecuaciones se pueden poner de forma matricial, resultando en una matriz tridiagonal de coeficientes que es resuelta en el modelo mediante el algoritmo de Thomas. Se llega a una ecuación que se resuelve iterativamente a partir de un valor inicial de la variable a calcular, repitiendo el proceso hasta que la variación de la solución entre dos interacciones sucesivas es pequeña. De ahí que el modelo requiera inicialmente el contenido de agua y nitrógeno en el suelo. Puesto que la solución por diferencias finitas de la ecuación anterior, puede causar una dispersión numérica considerable, los autores del programa realizaron una corrección para evitarla. Éstos encontraron que para incrementos de tiempo menores de 0.1 días y para capas con un espesor (Δz) inferior a 100 milímetros, la dispersión numérica era equivalente a un incremento en la dispersividad de $0.16\Delta z$. Esta corrección se aplicó únicamente al coeficiente de dispersión mecánica.

2.1.3 Transformación y extracción del nitrógeno

El modelo LEACHM contempla diferentes procesos relacionados con la dinámica del nitrógeno en el suelo, basados en su mayoría en las ecuaciones descritas por Johnsson en [28]. Algunos de estos procesos como la adsorción o la volatilización son de tipo físico-químico, pero la mayoría de ellos van ligados a la transformación de los compuestos orgánicos del suelo y a los flujos entre los diferentes compartimentos orgánicos contemplados en el modelo. Como en la mayoría de este tipo de modelos, el ciclo del nitrógeno va ligado al del carbono, para el que LEACHM contempla tres compartimentos que se muestran en la Figura 2.3.

Donde se observa el compartimento del humus del suelo, el de los restos vegetales que quedan tras un cultivo y el de las enmiendas orgánicas que se puedan realizar en el suelo. Estos dos últimos compartimentos, a través del proceso de descomposición y transformación que realiza la biomasa microbiana del suelo, alimentan el compartimento del humus (humificación), habiendo en este proceso unas pérdidas por respiración de la biomasa microbiana que efectúa la descomposición de los residuos orgánicos que llegan al suelo (mineralización). El humus del suelo tam-

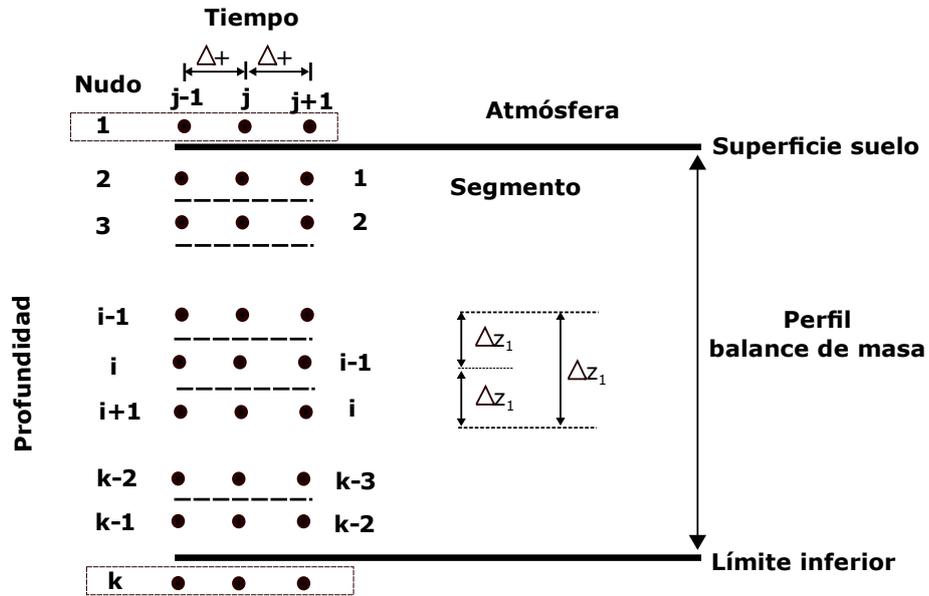


Figura 2.2: Definición de la malla unidimensional con nodos y segmentos en LEACHM para la resolución de las ecuaciones diferenciales por diferencias finitas

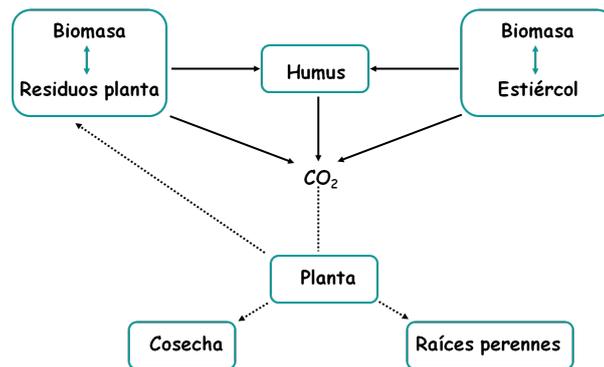


Figura 2.3: Compartimentos del ciclo del carbono en el modelo LEACHN

bién es afectado por la biomasa microbiana del suelo produciendo también una mineralización en este compartimento.

La descomposición de la materia orgánica del suelo se contempla en LEACHM mediante una cinética de primer orden,

$$\frac{dC_i}{dt} = -k_{mi} C_i , \quad (2.11)$$

siendo C_i el contenido de carbono en cada uno de los compartimentos considerados, k_{mi} la tasa de mineralización de cada compartimento y t el tiempo. De forma que el carbono orgánico en el suelo es:

$$C_{\text{organico}} = C_{\text{biomasa}} + C_{\text{humus}} + CO_2 .$$

Las relaciones entre los tres compartimentos vienen definidas por el factor de eficiencia f_e y el factor de humificación f_h , definidos como

$$f_e = \frac{C_{\text{humus}} + C_{\text{biomasa}}}{C_{\text{humus}} + C_{\text{biomasa}} + CO_2} ,$$

y

$$f_h = \frac{C_{\text{humus}}}{C_{\text{humus}} + C_{\text{biomasa}}} .$$

Las transformaciones del nitrógeno van ligadas a las del carbono, pero el ciclo de este elemento en el suelo es más complejo. Los principales procesos de transformación del nitrógeno contemplados en el modelo son: mineralización, nitrificación, desnitrificación y volatilización.

La Figura 2.4 muestra los tres compartimentos de nitrógeno orgánico (humus, enmiendas orgánicas, residuos vegetales), y las formas minerales urea, amonio y nitrato que admite el modelo, los principales procesos de transformación y los flujos de nitrógeno. Las líneas discontinuas representan los procesos de inmovilización, en los que la biomasa microbiana toma el nitrógeno mineral que necesita para completar sus procesos fisiológicos y lo inmoviliza hasta su muerte.

La transformación del nitrógeno orgánico en cada uno de los compartimentos contemplados sigue, al igual que en el caso del carbono, una cinética de primer orden

$$\frac{dN_i}{dt} = k_{mi} N_i, \quad (2.12)$$

siendo N_i el contenido de nitrógeno orgánico en cada uno de los compartimentos, k_{mi} la tasa de mineralización de cada uno de ellos y t el tiempo. El nitrógeno mineralizado pasa a la forma nítrica a través del proceso de nitrificación dependiente de la relación entre la cantidad de nitrato y la de amonio

$$\frac{dNH_4}{dt} = -k_{\text{nit}} \text{máx} \left(0, \frac{NH_4 - NO_3}{r_{\text{max}}} \right) , \quad (2.13)$$

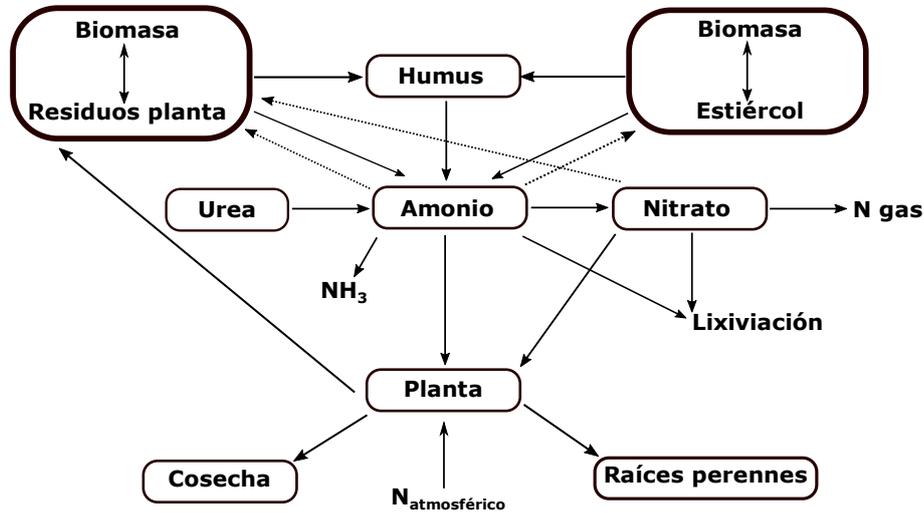


Figura 2.4: Compartimentos, transformaciones e interacciones del N incluidas en LEACHN.

siendo k_{nit} la tasa de nitrificación y r_{max} la máxima relación NO_3/NH_4 .

La desnitrificación sigue una cinética de primer orden respecto del contenido de nitrato del suelo,

$$\frac{dNO_3}{dt} = -k_{\text{desnit}} \frac{NO_3}{NO_3 + c_{\text{sat}}}, \quad (2.14)$$

siendo k_{desnit} la tasa de desnitrificación y c_{sat} una constante de saturación.

La volatilización sigue una cinética de primer orden respecto de la concentración de amonio en la superficie del suelo, y el modelo contempla la adsorción de amonio a través de una isoterma lineal.

El modelo requiere los contenidos iniciales de cada uno de los reservorios de nitrógeno en el suelo y las tasas o constantes aplicadas en cada proceso de transformación del nitrógeno. La extracción de nitrógeno por la planta es función de la densidad radicular y de la concentración de N mineral (amonio y nitrato) en la solución del suelo, y supone que sólo se produce extracción cuando hay transpiración. El modelo usa una función de demanda de extracción para estimar la extracción potencial de nitrógeno por la planta en cualquier momento del período de crecimiento. Esta función establece la tasa de extracción potencial de nitrógeno cuando no hay limitación de nutrientes y para ausencias de estrés hídrico en la planta.

La curva de demanda es una función adimensional que relaciona la fracción total de nitrógeno extraído con la fracción del período de crecimiento. Para realizar los

cálculos el modelo requiere datos de la máxima extracción anual de N para niveles de nutrientes no limitantes. Esta extracción anual máxima es a la que el modelo aplica la función de extracción potencial para el cálculo de la extracción máxima en cada momento. La extracción de nitrógeno por la planta puede ser menor que la potencial debido a factores limitantes en el movimiento de iones hacia el sistema radicular (bajo contenido de nitrógeno mineral en el suelo, no evapotranspiración, etc.). El modelo no permite que haya extracción fuera del período de cultivo.

2.1.4 Estructura y funcionamiento del modelo

El modelo tiene un programa principal que inicializa las variables, llama a las subrutinas necesarias y realiza el balance de masas. Este proceso, se esquematiza en las Figuras 2.6.

La separación de los diferentes procesos en subrutinas y la posibilidad de disponer del código FORTRAN, permite que cualquiera de éstas pueda ser mejorada o modificada con independencia del resto. LEACHN requiere una serie de datos iniciales que son leídos de un fichero preparado para cada simulación.

2.2 Modelo EU-Rotate_N

EU-Rotate_N es un modelo matemático de simulación desarrollado en el marco de un proyecto de investigación europeo, que tiene como base el modelo N_ABLE pero que mejora tanto su estructura como su formulación, y extiende su aplicación a un mayor número de cultivos y en un mayor rango de condiciones climáticas, edáficas y de prácticas agronómicas (sistemas de riego, rotaciones orgánicas, etc). El objetivo era desarrollar un nuevo modelo pensado como un sistema de ayuda a la toma de decisiones en el uso del nitrógeno en rotaciones de cultivo de las diferentes regiones climáticas de Europa, basado en las interacciones suelo-planta y minimizando los riesgos para el medio ambiente. Así mismo se pretendía optimizar la producción de cultivos hortícolas de calidad mejorando la sostenibilidad económica de la producción hortícola en la UE, y recomendar protocolos de Buenas Prácticas Agrícolas en los sistemas de cultivos hortícolas y herbáceos en toda Europa.

El modelo simula el crecimiento del cultivo y la dinámica del agua y del nitrógeno en el sistema suelo planta a escala diaria, considerando un espesor de suelo de 2 m y capas de 5 cm de espesor. Una de las principales características del modelo EU-Rotate_N, es su carácter bidimensional que permite una mayor flexibilidad en la simulación de sistemas y prácticas de cultivo específicas como, por ejemplo, la presencia de caballones o los diferentes sistemas de riego y abonado. Las capas de suelo son, por ello, divididas horizontalmente en celdas de 5 cm de ancho,

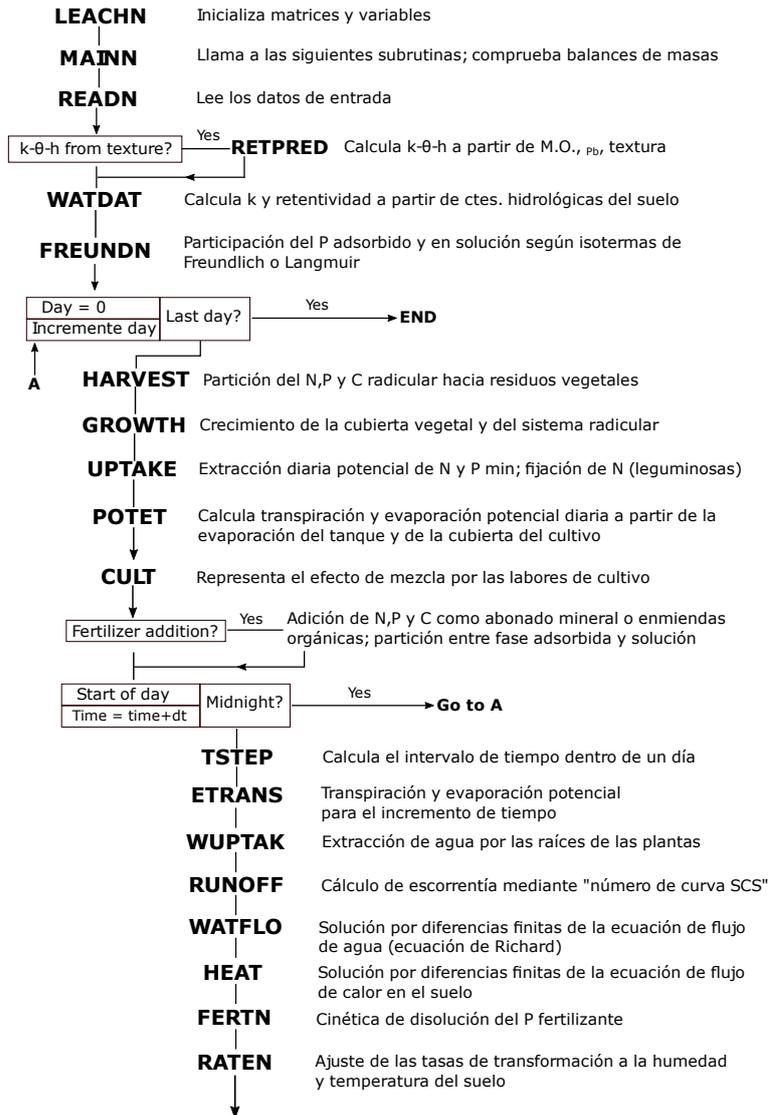


Figura 2.5: Diagrama de flujo LEACHN y descripción de las subrutinas que intervienen.

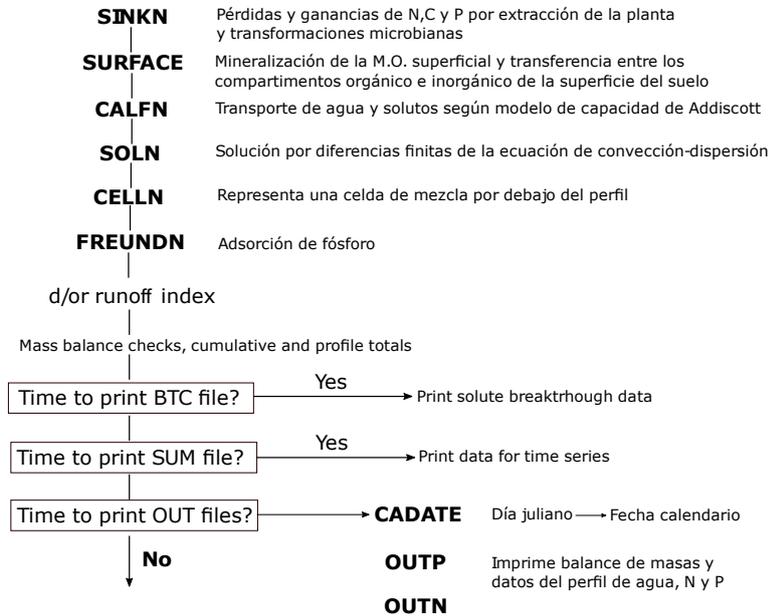


Figura 2.6: Diagrama de flujo LEACHN y descripción de las subrutinas que intervienen, (continuación).

contabilizando un número de celdas que es función de la distancia entre hileras de plantas.

El modelo consta de una serie de subrutinas que simulan entre otras cosas, el crecimiento de la planta, tanto de la parte aérea como del sistema radicular, la mineralización del nitrógeno del suelo, de los residuos de cosecha y de las enmiendas orgánicas, la absorción del nitrógeno por la planta y el balance entre disponibilidad y demanda para regular el crecimiento. Todos estos procesos están regulados por factores climáticos como la lluvia, la temperatura y la radiación, permitiendo la simulación de la escorrentía, el flujo de agua capilar, el cálculo de la evapotranspiración del cultivo, el crecimiento y la distribución radicular, así como el hielo/deshielo del suelo, entre otros procesos. El modelo también integra un módulo económico que enlaza las producciones con la información económica disponible para diferentes cultivos y regiones europeas, permitiendo el análisis económico del manejo del N en los cultivos. Las diferentes subrutinas operan según un orden establecido, utilizando los datos introducidos sobre las propiedades del suelo, uso de fertilizantes, riego y los datos meteorológicos. En la Figura 2.7 se muestra la organización de las subrutinas del modelo.

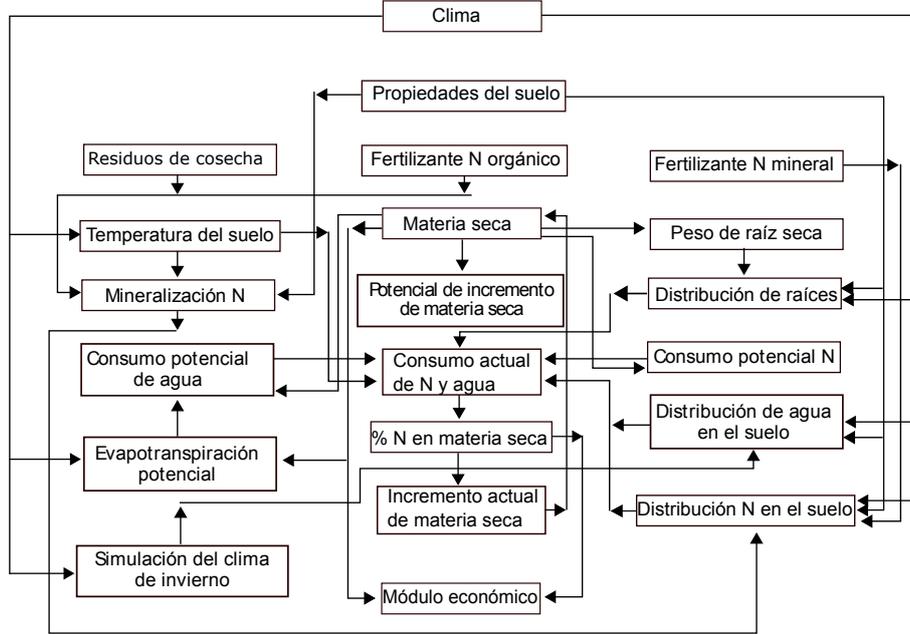


Figura 2.7: Diagrama de flujo de EU-Rotate_N y subrutinas que intervienen

2.2.1 Dinámica del agua en EU-Rotate_N

La evapotranspiración del cultivo se calcula mediante el método de la FAO que utiliza el coeficiente de cultivo dual [1]. Los parámetros necesarios son los relacionados con la demanda evaporativa de la atmósfera, resumida por la evapotranspiración de referencia (ET_0), la cual se calcula a partir de las variables meteorológicas del archivo de datos de clima. Los valores de los coeficientes de cultivo y la longitud de los diferentes períodos de desarrollo del cultivo, necesarios para su cálculo, se incluyen en un archivo de parámetros de cultivo (`Croptable.txt`). La longitud de cada etapa se calcula en proporción a los valores recogidos en el archivo `Croptable` y teniendo en cuenta el período de cultivo indicado por el usuario con las fechas de siembra y cosecha. Los valores de la tabla de cultivos pueden ser fácilmente ajustados por el usuario de acuerdo a las prácticas de cultivo locales. La dinámica del agua en el suelo es abordada mediante un modelo de capacidad basado en las humedades volumétricas del suelo a capacidad de campo, punto de marchitez permanente y saturación [55], e incluyendo una función de drenaje que permite la transferencia de agua de una capa a otra cuando la humedad θ es superior a la de capacidad de campo θ_{fc} , siempre que la capa inferior no este saturada, con una tasa diaria que viene dada por el coeficiente de drenaje C_{dr} ,

$$Dr_i = C_{dr} (\theta - \theta_{fci}) L_i , \quad (2.15)$$

siendo L_i el espesor de la capa (mm). El coeficiente de drenaje considera el tamaño de poro y, de acuerdo con Jones y Kiniry [29] se calcula para cada capa de suelo según su porosidad

$$C_{dr} = \frac{\theta_{sat} - \theta_{fc}}{\theta_{sat}} . \quad (2.16)$$

En cualquier caso, el usuario puede especificar un valor de este coeficiente para cada capa de suelo. El agua que no se infiltra en un día es almacenada en la superficie del suelo y se infiltra el día siguiente.

El modelo también considera flujo capilar ascendente y descendente utilizando un modelo clásico de difusión del agua en el suelo [57],

$$D_{i,i+1} = 88 \exp(35.4((\theta_i - \theta_{pw\ pi}) 0.5 + (\theta_{i+1} - \theta_{pw\ pi+1}) 0.5)) \quad (2.17)$$

donde $D_{i,i+1}$ es la difusividad media del agua por encima del punto de marchitez permanente (θ_{pwp} , $cm^3\ cm^{-3}$), 88 ($mm^2\ dia^{-1}$) es el valor de la difusividad para todos los suelos en el punto de marchitez permanente, y θ es la humedad volumétrica en las capas i y $i + 1$. La difusividad máxima permitida es $1000\ mm^2\ dia^{-1}$ en las celdas de 5 cm. El flujo capilar $C_{i,i+1}$ ($mm\ dia^{-1}$) se calcula como,

$$C_{i,i+1} = D_{i,i+1} \left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_i + \theta_{pw\ pi} - \theta_{pw\ pi+1}}{0.5(z_i + z_{i+1})} \right)$$

donde z (mm) es el espesor elemental de la capa de suelo. Valores positivos indican un flujo de agua de la capa $i + 1$ a la capa i , y valores negativos indican un flujo en sentido contrario. De forma similar, este algoritmo se utiliza para calcular el movimiento lateral de agua ($C_{j,j+1}$),

$$C_{j,j+1} = D_{j,j+1} \left(\frac{\theta_{j+1} - \theta_j + \theta_{pw\ pj} - \theta_{pw\ pj+1}}{(x_j + x_{j+1}) 0.5} \right)$$

donde $D_{j,j+1}$ es equivalente a la difusividad anteriormente mencionada pero para una transferencia horizontal de agua y x (mm) es la dimensión horizontal de la celda de suelo considerada. Valores positivos indican un flujo de agua de la celda $j + 1$ a la celda j , y valores negativos indican un flujo en sentido contrario.

La escorrentía se calcula de acuerdo al método propuesto por el NRCS [44].

2.2.2 Dinámica del nitrógeno y crecimiento del cultivo

La mineralización del nitrógeno a partir de la materia orgánica del suelo se basa en el enfoque adoptado en el modelo DAISY [19], el cual considera tres compartimentos orgánicos (humus del suelo, biomasa microbiana y materia orgánica añadida) con materiales que se descomponen a dos velocidades (lenta y rápida). Además, las tasas de descomposición vienen afectadas de la temperatura y de la humedad del suelo.

En las Figuras 2.8 y 2.9 se muestran los compartimentos y procesos considerados en el modelo.

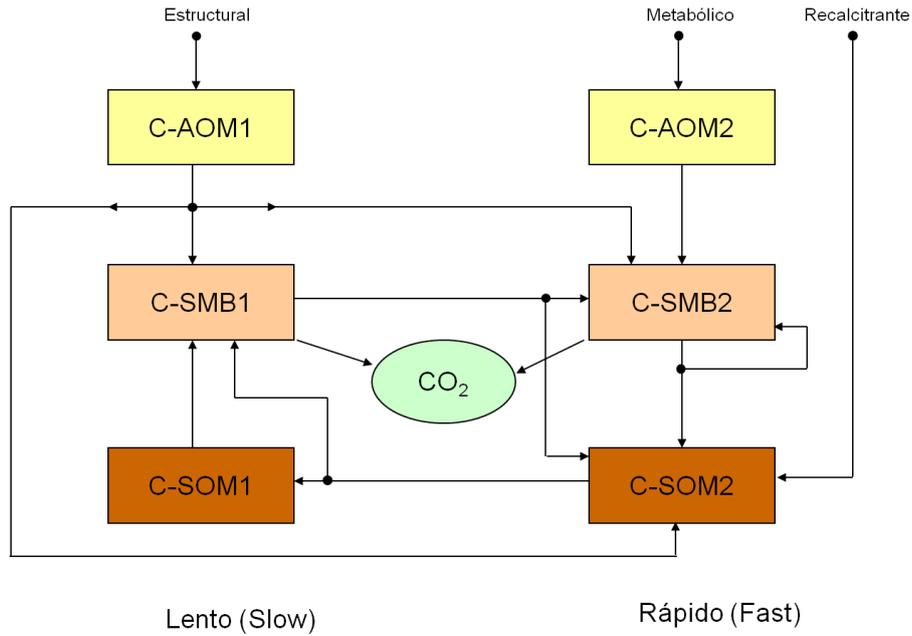


Figura 2.8: Compartimentos del ciclo del carbono para el modelo EU-Rotate_N.

La nitrificación sigue una cinética de Michaelis-Menten,

$$K_{\text{nit}} = V_n(T, \theta) \frac{NNH_4}{K_n + NNH_4}, \quad (2.18)$$

siendo K_{nit} la tasa de nitrificación, T la temperatura, θ la humedad, NNH_4 la concentración de nitrógeno amónico y K_n la constante de saturación.

La desnitrificación sigue un proceso similar, en este caso dependiente de la concentración de nitrato en el suelo. También considera la volatilización de amoníaco tras el aporte de estiércoles u otras enmiendas orgánicas, de acuerdo con el modelo ALFAM, [68].

Los parámetros necesarios para completar el cálculo de la mineralización, nitrificación, desnitrificación y volatilización se encuentran en un fichero denominado `Nminparameters.txt`. Los residuos de cultivo incorporados al suelo tienen una relación C/N que es función del contenido de nitrógeno de la planta durante la época de crecimiento. Las relaciones C/N de los diferentes cultivos y los coeficientes de partición vienen recogidos en el fichero `ResidueTable.txt`.

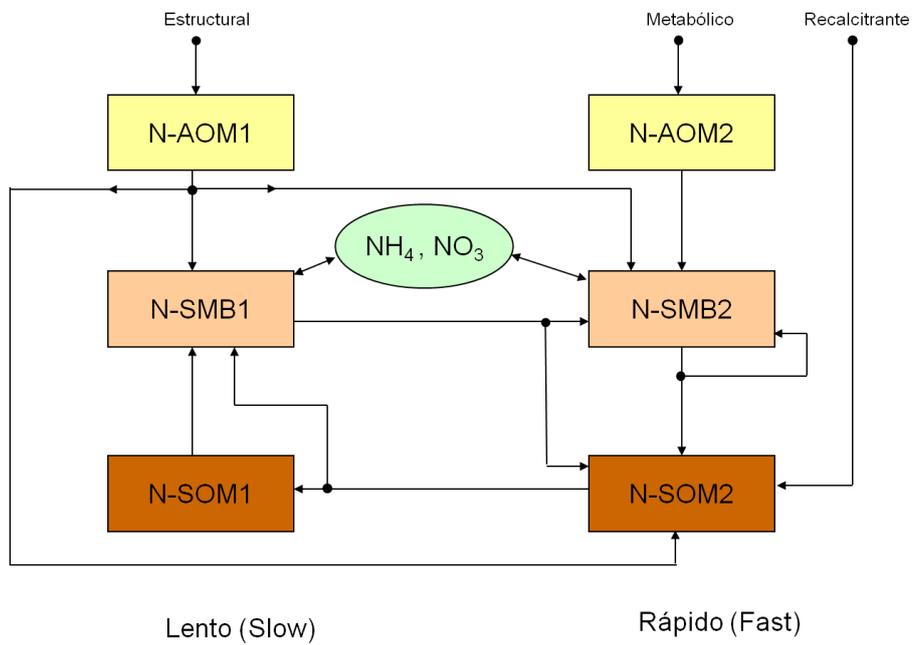


Figura 2.9: Compartimentos del ciclo del nitrógeno para el modelo EU-Rotate_N.

El modelo incorpora un módulo de crecimiento radicular que calcula la extensión del sistema radicular del cultivo a partir de la longitud de las raíces de la planta y la distribución del sistema radicular, que depende de la profundidad y de la distancia desde donde es calculada. El cálculo se hace en base a la temperatura acumulada desde la siembra del cultivo, considerando un período de retardo de acuerdo con la emergencia de la raíz. Estos parámetros se encuentran en el fichero Croptable.txt. La biomasa radicular se calcula a partir de la biomasa aérea y la clase de raíz. La longitud total de la raíz se calcula con la biomasa radicular simulada y la longitud de raíz específica de cada cultivo.

El crecimiento del cultivo es función de la concentración diaria de N en la biomasa aérea y del potencial de crecimiento máximo [53], que se define por el usuario a través del valor de materia seca previsto en la cosecha. El nitrógeno extraído por la planta se obtiene en función de la demanda del cultivo en un día específico y de la capacidad de la raíz de absorber el nitrógeno ese mismo día. La demanda es definida por el modelo de crecimiento del cultivo. La extracción potencial de nitrógeno del suelo se calcula en función de la longitud de la raíz en cada unidad del suelo, el contenido de amonio y nitrato en cada unidad de suelo y del valor del parámetro SN obtenido de la tabla de parámetros del cultivo, para controlar la efectividad de la absorción del nitrógeno.

Para cada día el incremento de materia seca en la planta se calcula a partir de la ecuación

$$\Delta W = \frac{K_2 G_N G_T G_W W}{K_1 + W}, \quad (2.19)$$

donde W es el peso seco acumulado, K_2 es un parámetro cuyo cálculo se describe a continuación, $K_1 = 1 \text{ t ha}^{-1}$, G_T es el número de grados día efectivos en ese día dividido por el promedio de grados día durante todo el período vegetativo, siendo el grado día efectivo el promedio de la temperatura diaria menos la temperatura base, con la limitación de que si la media de temperatura superior a 20°C , entonces es igual a 20°C , G_N y G_W son los coeficientes de crecimiento del cultivo dependientes del porcentaje de N y del suministro de agua. K_2 se calcula a partir de la integral de la ecuación (2.19) anterior con G_N , G_W y G_T igual a 1.

Utiliza una ecuación unificada para definir el porcentaje de N crítico para diferentes cultivos,

$$\%N_{\text{crit}}$$

donde $\%N_{\text{crit}}$ es el porcentaje crítico de N, y a y b son coeficientes que varían según los cultivos (definidos en la tabla de parámetros del cultivo).

Para cada día el coeficiente de crecimiento G_N se calcula como

$$G_N = \min\left(\frac{\%N}{\%N_{Crit}}, 1\right), \quad (2.20)$$

donde $\%N$ es el porcentaje real de N en la materia seca de la planta (con exclusión de las raíces fibrosas). Del mismo modo, el coeficiente de crecimiento G_W se calcula como

$$G_W = \frac{TR_{act}}{TR}, \quad (2.21)$$

donde, TR y TR_{act} son las tasas de transpiración actual y potencial.

Capítulo 3

Metodología para la estimación de parámetros

Generalmente, la estimación de parámetros es parte de un proceso iterativo utilizado para desarrollar modelos para sistemas que deben tener valor predictivo [56] y se han de comparar con datos experimentales. Consideraremos modelos deterministas, esto es, supondremos que los distintos procesos que tienen lugar en el sistema se pueden describir mediante un conjunto de ecuaciones algebraicas y diferenciales. Estas ecuaciones dependen de una serie de parámetros cuyo valor es, en principio, desconocido. No obstante, a partir de estudios previos, es posible conocer un rango de variación para los mismos. Este rango de variación define un cierto espacio donde se ha de buscar un valor óptimo para los parámetros del modelo.

La estimación de parámetros de un modelo se puede plantear como un problema inverso, consistente en determinar el valor de los parámetros del modelo utilizando las predicciones del mismo que se comparan con medidas experimentales disponibles para algunas variables predichas por el modelo. Éste es un problema difícil y no siempre tiene solución. Los métodos de estimación de parámetros transforman el problema inverso, esencialmente, en un problema de optimización con restricciones para una función error que mide la discrepancia entre las predicciones del modelo y el valor de los datos experimentales disponibles [3].

Más concretamente, supongamos que se dispone de N medidas experimentales y_1, y_2, \dots, y_N , que corresponden a las salidas del modelo

$$y_i = M(t_i, p), \quad i = 1, \dots, N,$$

siendo $p = p_1, \dots, p_k$ los parámetros a determinar. Una posible función error en términos de la norma 2, viene dada por

$$e(p) = \frac{\left(\sum_{i=1}^N (y_i - M(t_i, p))^2 \right)^{1/2}}{\left(\sum_{i=1}^N y_i^2 \right)^{1/2}}, \quad (3.1)$$

aunque otras funciones de error se pueden definir basadas en otras normas u otras normalizaciones [66]. Los valores de los parámetros estimados para el modelo vienen dados por

$$p = \arg \min_p (e(p)) .$$

Que se pueda resolver o no el problema inverso de estimación de parámetros de un modelo, depende del tipo de modelo que se estudie, de que los datos experimentales disponibles sean o no significativos y de los errores experimentales. De este modo, además de la dificultad del proceso de optimización en sí, para la estimación de parámetros de un cierto modelo se ha de tener en cuenta si los datos experimentales disponibles son suficientes en número y en calidad. Así, por ejemplo, una restricción básica que se tiene si se quieren determinar m parámetros de un modelo es que al menos serán necesarias m medidas experimentales. Por otro lado, las medidas disponibles han de ser suficientemente representativas para los procesos que se quieran estudiar y deben tener asociado un error experimental razonable.

El primer paso necesario para el uso de modelos de transporte de agua y nitrógeno en el suelo es su calibración, ello implica conocer los valores óptimos de los parámetros de los que depende el modelo matemático que describe el sistema. Algunos de estos parámetros se pueden determinar experimentalmente o están descritos en la literatura pero, en otros casos, es necesario determinar éstos a partir de las medidas experimentales de distintas variables que intervienen en el modelo. Por ello, se ha de desarrollar una metodología de estimación de parámetros útil para este tipo de modelos. Como ya se ha comentado, los modelos generales de transporte de agua y nitrógeno en el suelo, como los que están implementados en los códigos LEACHN y EU-Rotate_N tienen un gran número de parámetros que es necesario determinar. Por otra parte, las medidas de distintas variables predichas por estos modelos en una explotación comercial no son sencillas de realizar y tienen un coste económico elevado. Por ello, la metodología propuesta para la estimación de parámetros de estos modelos ha de poder adaptarse a disponer de un número limitado de medidas.

Al disponer de un número reducido de medidas y un elevado número de parámetros este tipo de modelos presentan el problema conocido como sobreparametrización, que, en esencia, consiste en que es posible encontrar distintas combinaciones de

los parámetros del modelo que se ajusten a los datos disponibles. Para resolver este problema, se propone realizar un análisis de sensibilidad de los parámetros del modelo que nos permita establecer un orden para los parámetros atendiendo a la influencia que tienen sobre la respuesta del modelo, comparando ésta con los datos experimentales disponibles mediante una función error como la expuesta en (3.1). De este modo, es posible elegir para el procesos de optimización el subconjunto de parámetros más influyente en cada proceso estudiado, fijando los demás parámetros del modelo a un valor típico.

En primer lugar se describen los dos métodos de análisis de sensibilidad que se han evaluado para la reducción del número de parámetros a estimar en los modelos LEACHM y EU-Rotate_N y, a continuación, se expone el método de optimización del que se ha hecho uso para la estimación de los parámetros.

3.1 Análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad permite valorar la influencia de las entradas (inputs) en las predicciones del modelo y comprobar en cada caso, los parámetros que más influyen en las variables de salida (output). El objetivo del análisis de sensibilidad es determinar cómo se comportan las salidas de un modelo con respecto a los parámetros de entrada del modelo que están sujetos a la incertidumbre y la variabilidad. Esto es útil como una herramienta de guía cuando el modelo está en fase de desarrollo, así como para entender el comportamiento del modelo cuando se utiliza para la predicción o para ayuda en la toma de decisiones. Para los modelos dinámicos, el análisis de sensibilidad está estrechamente relacionado con el estudio de la propagación de errores [43].

Por otra parte, el análisis de incertidumbre consiste en evaluar cuantitativamente la incertidumbre o la variabilidad en los componentes del modelo (parámetros, variables de entrada, ecuaciones) para una situación dada, deduciendo una distribución de la incertidumbre para cada variable de salida en lugar de un valor único. Una consecuencia esencial es que proporciona métodos para evaluar, por ejemplo, la probabilidad que una respuesta supere un cierto umbral, esto hace al análisis de incertidumbre un componente clave del análisis de riesgos.

Debido a que los análisis de incertidumbre y sensibilidad por lo general se basan en simulaciones, también están estrechamente relacionados con los métodos asociados con experimentos informáticos. Un experimento informático es un conjunto de simulaciones diseñadas con el fin de explorar de manera eficiente las respuestas de los modelos cuando la entrada varía dentro del rango dado. Para nuestro trabajo aceptaremos que los objetivos en los experimentos de ordenador incluyen la optimización de la respuesta del modelo, la visualización del comportamiento

del modelo, la aproximación por un modelo más simple para la estimación de la media, la varianza o la probabilidad de la respuesta a superar cierto umbral.

El análisis de incertidumbre y el análisis de sensibilidad pueden tener diversos objetivos, tales como:

- Comprobar que la salida del modelo se comporta como se esperaba cuando la entrada varía.
- Identificar el nivel de influencia en la salida de cada parámetro de entrada.
- Identificar qué parámetros deben estimarse con mayor precisión.
- Detectar y cuantificar los efectos de interacción entre los parámetros.
- Determinar la posible simplificación del modelo.

Algunos de estos objetivos tienen estrechos vínculos con otros métodos asociados con el modelado, como la construcción de modelos, la estimación de parámetros y el uso del modelo para apoyar la toma de decisiones. La diversidad de motivaciones para realizar el análisis de sensibilidad se asocia con una gran variedad de métodos y técnicas que se exponen en referencias tales como [59], [58], [61], [63], [62], [60].

Existen diferentes tipos de análisis de sensibilidad que se puede realizar en función de los objetivos que se pretenden [43]. El análisis de sensibilidad local se basa principalmente en la estimación de la derivada local de la salida del modelo con respecto a los parámetros de entrada del modelo. Esta derivada indica la rapidez con que crece o decrece localmente la salida con respecto a los valores de los parámetros de entrada. El análisis de sensibilidad local proporciona información únicamente en el punto donde las derivadas son calculadas sin tomar en cuenta el resto del intervalo de variación de las entradas. Otro tipo de análisis de sensibilidad se denomina análisis de sensibilidad global y asigna la incertidumbre de la salida del modelo a la incertidumbre de los parámetros de entrada, permitiendo calcular las sensibilidades sobre el rango de variación completo de los parámetros de entrada. Los métodos de sensibilidad global son mucho más caros desde el punto de vista computacional, por ello, su uso está limitado por el coste computacional de la evaluación del modelo a estudiar.

La estructura y las propiedades de los modelos de simulación pueden influir en la elección del análisis de sensibilidad. Una de las razones es que los objetivos dependen de las capacidades y la complejidad del modelo. Más específicamente, el número de entradas (variable o parámetros), el número de salidas y la velocidad con la que el modelo M puede ser calculada puede variar enormemente en aplicaciones y estas cantidades, obviamente, juegan un papel importante en el objetivo de un análisis de sensibilidad y en la adecuación de los diferentes métodos disponibles. Algunos métodos son adaptados para un pequeño número de modelos de simulación, por

ejemplo, los métodos basados en un muestreo de Montecarlo. Un precio debe ser pagado durante el uso de métodos más económicos, y este precio depende de las principales propiedades del modelo, puede ser necesario seleccionar un número de factores menores que los deseados, o la mayoría de las interacciones entre los factores pueden tener que ser asumido como insignificante, o la investigación puede ser incapaz de detectar desviaciones de la linealidad o cerca de linealidad del modelo. Se sigue que algún método se adapta bien sólo si el modelo se comporta bien en cierto sentido, mientras que otro método es más independiente del modelo más robusto que el comportamiento del modelo complejo como la no linealidad, discontinuidades, no monotonicidad o interacciones complejas entre factores.

3.1.1 Factores de entradas

Los componentes del modelo, cuya influencia en la salida se investigará, serán llamados los factores o parámetros de entrada del análisis de sensibilidad. Un factor de entrada puede ser:

- Un conjunto de estructuras del modelos o relaciones funcionales dentro de un sub-módulo del modelo.
- Uno o varios parámetros variables.
- Una variable de entrada.
- Una serie de varias variables de entrada relacionadas.

La elección de los factores de entrada depende del objetivo del análisis de sensibilidad. Deben incluir, por supuesto, los componentes del modelo de interés en el estudio. Pero en muchos casos, la sensibilidad del modelo con respecto a estos componentes es probable que dependa de componentes adicionales. Por ejemplo, la sensibilidad de un modelo de cultivo con respecto a sus principales parámetros a menudo es altamente dependiente de los valores de las variables de clima o de suelo. En consecuencia, estas variables también deben ser consideradas para su inclusión en la lista de factores de entrada, a menos que, en su defecto, los análisis de sensibilidad independientes se realizan con diferentes modalidades de estas variables.

Debemos tener en cuenta que cada variable de entrada del modelo puede o no ser seleccionada como un factor de entrada del análisis de sensibilidad. Por ejemplo, si un análisis de sensibilidad se realiza para un tipo de suelo dado, las variables de entrada relacionadas con el suelo pueden ser fijas. En este caso, no se incluirán las variables de entrada del suelo entre los factores de entrada del análisis de sensibilidad. El término factor de entrada se reserva generalmente para los factores a ser usados en el análisis de sensibilidad.

3.1.2 Análisis de sensibilidad local (Un factor de entrada)

La sensibilidad de un modelo puede ser definida con respecto a sus entradas; es posible medir la sensibilidad de la relación entre un único factor de entrada p y una salida del modelo $Y = M(p)$. El análisis de sensibilidad local se basa en las derivadas de la salida Y con respecto al factor de entrada p , la cual indica la rapidez con la cual la salida aumenta o disminuye localmente alrededor de los valores de p en los que se evalúa la derivada.

En ocasiones las derivadas pueden ser calculadas analíticamente, pero suelen ser calculadas numéricamente para modelos complejos. Pueden surgir problemas si la derivada del modelo no existe en algunos puntos. Además, las derivadas pueden depender fuertemente del valor de p en las que se evalúan.

El coeficiente local (de primer orden), $S_i^{\text{local}}(p_k)$, es definido como la derivada parcial de la variable de salida $Y = M(p)$ con respecto al factor p_i , evaluado en el escenario p_k :

$$S_i^{\text{local}}(p_k) = \left. \frac{\partial M(p)}{\partial p_i} \right|_{p_k}. \quad (3.2)$$

Este criterio es equivalente a calcular la pendiente de la salida del modelo calculada en el espacio de parámetros.

El criterio $S_i^{\text{local}}(p_k)$ es una medida absoluta de la sensibilidad, que depende de las escalas de medición o unidades de Y o p_i . Una versión normalizada, llamada la sensibilidad relativa, se define por

$$S_i^{\text{local}}(p_k) = \left. \frac{\partial M(p)}{\partial p_i} \right|_{p_k} \frac{p_{k,i}}{M(p_k)}. \quad (3.3)$$

El análisis de sensibilidad local se puede utilizar para estudiar el papel de algunos parámetros o variables de entrada en el modelo. Pero este método es menos útil que el análisis de sensibilidad global cuando el propósito del análisis es estudiar el efecto de la incertidumbre de varios factores sobre los resultados del modelo.

3.1.3 Análisis de sensibilidad global (Varios factores de entrada)

En el análisis de sensibilidad global la variabilidad de la salida se evalúa cuando los factores de entrada varían en todo su dominio de incertidumbre. Esto proporciona una visión más realista del comportamiento del modelo cuando se utiliza en la práctica.

El grado global de la asociación entre p e Y sobre el intervalo $[p_{\min}, p_{\max}]$ primero se puede medir a través de la aproximación del modelo en estudio. Por ejemplo,

si el modelo de simulación se aproxima por una relación lineal entre p e Y , la sensibilidad puede ser medida por el coeficiente de correlación al cuadrado o por la correlación lineal entre p e Y .

Cuando hay más de un factor de entrada, llamaremos análisis de sensibilidad global al que se obtiene si tenemos el caso de una interacción entre los factores de entrada, por ejemplo, p_1 y p_2 , la sensibilidad de la salida Y a p_1 depende del valor de p_2 y viceversa. Esta situación se produce con la mayoría de los modelos, porque los modelos de simulación no son funciones simplemente aditivas de parámetros y variables de entrada.

Es una práctica común medir la sensibilidad para cada factor de entrada p_i por separado, con todos los otros factores fijos a sus valores nominales individuales. Sin embargo, esto impide que las interacciones sean detectadas y cuantificadas. Tener en cuenta las interacciones es un aspecto clave de la mayoría de los métodos de sensibilidad global.

La sensibilidad total da una medida exhaustiva de la influencia de un factor de entrada. Esta medida se puede descomponer en efectos principales e interacciones, y esta descomposición suele dar una visión más clara sobre el comportamiento del modelo. Como conclusión podemos afirmar que, los dos tipos de criterios tanto el de sensibilidad local como el de sensibilidad global son útiles y complementarios. Una revisión de los métodos más importantes para el análisis de sensibilidad local y global de modelos se recoge en [58].

En el presente estudio utilizaremos el análisis de sensibilidad global; se considerarán dos métodos, el *Latin Hypercube-One Factor at a Time* (LH-OAT) [30] y el método *Fourier Amplitude Sensitivity Test* (FAST) [6], este último método se basa en la descomposición de la varianza asociada a la salida del modelo. En las secciones siguientes se describen con detalle los fundamentos de cada uno de los métodos.

3.2 Método Latin Hypercube One-Factor At a Time (LH-OAT)

El método LH-OAT se describe en la referencia [30], y es una generalización de los métodos *One-Factor-At-a-Time* (OAT), que consisten en la repetición de un método de sensibilidad local, en el cual las derivadas son calculadas para cada parámetro manteniendo el valor de los otros parámetros fijos para distintos puntos muestreados en el espacio de los parámetros. (Cada parámetro es variado en un rango determinado y se valora el impacto de dicho cambio sobre las variables de interés).

Para describir globalmente el análisis de sensibilidad, se calculan los índices de sensibilidad local sobre una muestra de los distintos valores que pueden tomar los parámetros de entrada y, posteriormente, se realiza un promedio de estos índices. Para realizar este muestreo se puede hacer uso de un método de Montecarlo, pero este método presenta un coste computacional elevado. Como alternativa para obtener una muestra de los posibles valores de los parámetros se utiliza un muestreo mediante el hipercubo latino (LHS), propuesto por McKay [40], que es un caso particular de muestreo estratificado. El muestreo LHS funciona mejor que el muestreo aleatorio cuando la salida está dominada por unos pocos componentes de los factores de entrada. El método asegura que cada uno de estas componentes está representada de una manera estratificada, sin importar qué componentes pueden llegar a ser importantes. LHS es mejor que el muestreo aleatorio para la estimación de la media y para la función de distribución de la población. LHS es asintóticamente mejor que el muestreo aleatorio, ya que proporciona un estimador (de la expectativa de la función de salida) con una menor varianza. LHS produce estimaciones sesgadas de la varianza de las variables de salida.

El método LHS divide la distribución de cada parámetros entre N niveles con una probabilidad de ocurrencia igual a $1/N$. Para las distribuciones uniformes, el rango del parámetro se subdivide en N intervalos iguales. Los valores aleatorios de los parámetros se generan de tal manera que para cada uno de los parámetros p , cada intervalo se muestrea sólo una vez [74]. Este enfoque resulta en N realizaciones no superpuestas y el modelo se ejecuta N veces, lo cual ayuda a la eficiencia computacional.

El método de análisis de sensibilidad LH-OAT combina el diseño OAT y el muestreo LH, tomando el muestreo LH como punto inicial para un diseño OAT.

Si el análisis de sensibilidad se realiza para k parámetros, p_1, \dots, p_k , el método para análisis de sensibilidad LH-OAT inicia dividiendo el rango de variación de cada parámetro en N intervalos o niveles y entonces toma N puntos de muestra LH por parámetro, $(p_{1,j}, p_{2,j}, \dots, p_{k,j})$, $j = 1, \dots, N$. El índice de sensibilidad, I_i , asociado a cada parámetro, p_i , se calcula mediante la expresión

$$I_i = \sum_{j=1}^N \frac{|M(p_{1,j}, \dots, p_{i,j}(1 + f_i), \dots, p_{k,j}) - M(p_{1,j}, \dots, p_{i,j}, \dots, p_{k,j})|}{N f_i M(p_{1,j}, \dots, p_{i,j}, \dots, p_{k,j})} \quad (3.4)$$

donde $M()$ se refiere a la función del modelo, N es el número de niveles considerado para cada parámetro y f_i es la fracción por la cual el parámetro p_i se varía para la aproximación de la derivada, que en la implementación que se ha hecho del método se ha tomado como $f_i = 0.05$.

El número de veces que se requiere ejecutar el modelo de simulación al utilizar el método LH-OAT depende del número de parámetros considerados y el número de niveles para cada parámetro. Si se tienen k parámetros y N niveles, el método

de análisis de sensibilidad LH-OAT requiere ejecutar el modelo de simulación un total de $N \times (k + 1)$ veces [30].

Dado que el muestreo mediante el método del hipercubo latino es, en cierto modo aleatorio, la repetición del método LH-OAT no tiene porque dar los mismos resultados para los índices de sensibilidad I_i asociados a los distintos parámetros estudiados en el análisis de sensibilidad. Por ello, se hacen varias repeticiones del método, considerando como medida de la sensibilidad de la respuesta del modelo a cada uno de los parámetros analizados la media y la desviación estándar del los índices I_i .

3.3 Fourier Amplitude Sensitivity Testing (FAST)

Fourier Amplitude Sensitivity Testing (FAST) es un método de análisis de sensibilidad global basado en la descomposición de la varianza total de la salida del modelo. El método fue introducido en los años 70 en la referencia [12].

La base teórica del método consiste básicamente en explorar el espacio de parámetros del modelo utilizando una serie de curvas de búsqueda y evaluar la contribución principal de cada parámetro sobre la salida del modelo.

A continuación, se revisan los fundamentos de este método. Supongamos que se tiene un modelo [59] con una salida escalar Y ,

$$Y = M(p) ,$$

donde $p = (p_1, \dots, p_k)$ son los parámetros de entrada del modelo. Sin pérdida de generalidad, se asume que el dominio de variación de los parámetros es el hipercubo unidad

$$K^k = \{p / 0 \leq p_i \leq 1, i = 1, \dots, k\} .$$

Se asume también que p es un vector de variables aleatorias que siguen una distribución cuya función densidad es $P(p) = P(p_1, \dots, p_k)$. El momento r -ésimo asociado a la variable de salida del modelo es

$$\langle y^r \rangle = \int_{K^n} M^r(p_1, \dots, p_k) P(p_1, \dots, p_k) dp . \quad (3.5)$$

Para evitar el cálculo de integrales múltiples sobre el espacio de parámetros, se hace uso de curvas de búsqueda en este espacio que vienen dadas por

$$p_i(s) = G_i(\text{sen}(w_i s)) , i = 1, \dots, k, \quad (3.6)$$

donde s es una variable escalar que satisface $-\infty < s < \infty$ y G_i son funciones cuyas propiedades se discutirán más tarde. w_i son frecuencias asociadas a cada uno de los factores.

Al variar s cada factor varía periódicamente con su correspondiente frecuencia w_i . Si el factor i -ésimo tiene una fuerte influencia en la salida, las amplitudes de la oscilación asociada a la frecuencia w_i y sus armónicos serán de gran amplitud. Esta es la base que utiliza el método FAST para el cálculo de una medida de sensibilidad del modelo basada en las amplitudes asociadas a la frecuencia w_i y sus armónicos.

Las curvas de búsqueda en el espacio de parámetros pasarán arbitrariamente cerca de cada uno de los puntos del espacio de parámetros sí y sólo sí el conjunto de frecuencias w_i utilizado es inconmensurable, esto es, se satisface,

$$\sum_{i=1}^n r_i w_i = 0 ,$$

para coeficientes enteros r_i sí y sólo sí $r_i = 0$, $i = 1, \dots, k$. Además las curvas de búsqueda no se cierran sobre sí mismas.

Con estas condiciones, si se hace uso del Teorema Ergódico los momentos de la salida del modelo se pueden calcular mediante la expresión

$$\bar{y}^{(r)} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T M^r(p_1(s), \dots, p_k(s)) ds , \quad (3.7)$$

donde, para simplificar la notación, hemos supuesto que los factores de entrada del modelo se distribuyen uniformemente en K^k .

De este modo, la varianza de la salida del modelo viene dada por

$$D = \langle y^{(2)} \rangle - \langle y^{(1)} \rangle^2 = \bar{y}^2 - (\bar{y}^{(1)})^2 ,$$

y se puede evaluar calculando integrales unidimensionales.

Para obtener un conjunto de frecuencias inconmensurables, éstas deberían ser números irracionales y no es posible utilizar este tipo de frecuencias debido a la precisión finita de los ordenadores. Si se utiliza un conjunto de frecuencias enteras [12], existe un número $T = 2\pi$ de forma que $M(s) = M(s + T)$, donde $M(s) = M(p_1, \dots, p_k)$. Las curvas de búsqueda se cierran sobre sí mismas y no se cumple el Teorema Ergódico, esto es,

$$\langle y^{(r)} \rangle \neq \bar{y}^{(r)} .$$

En estas condiciones se considera $M(s)$ con $s \in (-\pi, \pi)$ y se tiene

$$\bar{y}^{(r)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} M^r(s) ds ,$$

y la aproximación de la varianza de la salida del modelo se puede escribir como

$$\begin{aligned}\hat{D} &= \bar{y}^{(2)} - \left(\bar{y}^{(1)}\right)^2 = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} M^2(s) ds - \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} M(s) ds\right)^2 .\end{aligned}\quad (3.8)$$

Como $M(s)$ es periódica, se puede utilizar su desarrollo en serie de Fourier

$$y = M(s) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} (A_j \cos(js) + B_j \text{sen}(js)) ,$$

donde

$$A_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} M(s) \cos(js) ds , B_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} M(s) \text{sen}(js) ds .$$

El espectro de la serie de Fourier se define como

$$\Lambda_j = A_j^2 + B_j^2 .$$

Como $M(s)$ es real, se satisface que

$$A_{-j} = A_j , B_{-j} = B_j , \Lambda_{-j} = \Lambda_j .$$

Evaluando el espectro de la frecuencia fundamental w_i y sus armónicos, $l w_i$, se puede estimar \hat{D}_i , o sea, la parte de la varianza de la salida del modelo que es debida a la incertidumbre en el parámetro p_i ,

$$\hat{D}_i = \sum_{l \in \mathbb{Z}^0} \Lambda_{l w_i} = 2 \sum_{p=1}^{+\infty} \Lambda_{p w_i} ,$$

donde $\mathbb{Z}^0 = \mathbb{Z} \sim \{0\}$.

La varianza total de la salida del modelo se puede estimar como

$$\hat{D} = \sum_{j \in \mathbb{Z}^0} \Lambda_j = 2 \sum_{j=1}^{+\infty} \Lambda_j .$$

ya que debido al Teorema de Parseval

$$\sum_{j \in \mathbb{Z}} \Lambda_j = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} M^2(s) ds = \bar{y}^2 .$$

De este modo, los índices de sensibilidad de primer orden obtenidos mediante el método FAST vienen dados por

$$S_i = \frac{\hat{D}_i}{\hat{D}} . \quad (3.9)$$

Si se consideran las frecuencias que no pertenecen al conjunto

$$\{l_1 w_1, l_2 w_2, \dots, l_k w_k\}, \quad l_i = 1, 2, \dots, \infty, \quad i = 1, \dots, k$$

estas frecuencias dan cuenta de la varianza residual

$$D - \sum_{i=1}^k D_i ,$$

que no se tiene en cuenta en los índices de primer orden y que incluye las interacciones entre factores de cualquier orden.

Se puede desarrollar una estrategia que extiende el método FAST [59] de forma que se pueden estimar las varianzas $\hat{D}_{\sim i}$, donde se indica que varían todos los parámetros del modelo salvo el i -ésimo, obteniendo índices de variación total para el parámetro i -ésimo definidos como

$$S_{T_i} = \frac{\hat{D} - \hat{D}_{\sim i}}{\hat{D}} . \quad (3.10)$$

Para construir las curvas de búsqueda en el espacio de parámetros, es necesario seleccionar una funciones G_i . En [11], se propuso que las funciones G_i deben satisfacer la ecuación

$$\pi (1 - p_i^2)^{1/2} P_i(G_i) \frac{dG_i}{dp_i} = 1 , \quad (3.11)$$

donde P_i es la función de distribución de probabilidad asociada con el parámetro p_i . Si suponemos que la distribución de probabilidad que siguen los parámetros del modelo es uniforme una posible solución de la ecuación (3.11) es de la forma [59],

$$p_i = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arcsin(\sin(w_i s)) . \quad (3.12)$$

En [59] se propone utilizar una variante de estas curvas dadas por

$$p_i = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arcsin(\sin(w_i s + \varphi_i)) , \quad (3.13)$$

donde φ_i es una fase aleatoria elegida uniformemente en $[0, 2\pi]$.

En este trabajo, se ha utilizado la implementación del método presentada en [6] y que está se recoge en la librería de Matlab GSAT.

3.4 Método de optimización

Como ya hemos visto, una vez se decide qué parámetros son los importantes para el modelo y el proceso a estudiar, se utiliza un método de optimización que permita ajustar los valores de los parámetros a partir de una serie de datos experimentales [3]. Se reduce así el problema de estimación de parámetros a un problema de optimización de una cierta función objetivo en un cierto espacio para los parámetros. En nuestro caso la función objetivo es la función error que mide la discrepancia entre la salida del modelo y los datos experimentales y el problema de minimización es encontrar el valor de los parámetros que hacen mínimo este error.

En general, hay dos tipos de métodos de optimización, los métodos de optimización local y los métodos de optimización global. Los métodos de optimización local suelen converger rápidamente pero, en general, convergen a un óptimo local de la función objetivo, que no tiene porque coincidir con el óptimo global que se va buscando.

Los métodos de optimización global buscan en todo el espacio de parámetros para tratar de encontrar el óptimo global de la función y, en general, son muy costosos desde el punto de vista computacional ya que requieren evaluar la función objetivo un número elevado de veces. Algunos de estos métodos son, por ejemplo el *simulated annealing*, que es un método estocástico propuesto por Kirpatric y sus colaboradores [32]. Para la optimización el algoritmo simula un proceso de enfriado asociando el estado de mínima energía del sistema al mínimo de la función objetivo. El método es, en esencia, un método de Montecarlo en donde se muestrean los parámetros de la función objetivo siguiendo una distribución de probabilidad de Boltzmann-Gibbs. En las distintas iteraciones se van generando conjuntos de valores de los parámetros que tienen asociada una temperatura decreciente según un determinado esquema [18].

Otros algoritmos de optimización global son los algoritmos evolutivos o algoritmos genéticos, que se inspiran en la evolución biológica. De este modo, las soluciones potenciales para el valor de los parámetros de la función objetivo forman parte de una población de individuos. Para obtener nuevas posibles soluciones los individuos en la población se reemplazan por una serie de mecanismos como la reproducción, la selección natural, la mutación, la recombinación, etc. Hay muchos algoritmos de este tipo y una revisión exhaustiva de los mismos puede encontrarse en [16].

Bajo ciertas condiciones, los métodos de optimización global convergen al óptimo global de la función objetivo pero, como ya hemos comentado, requieren de un gran número de evaluaciones de la función objetivo. Esto hace que salvo para modelos que se puedan evaluar muy rápidamente, como los que se pueden expresar mediante fórmulas analíticas, el uso de estos métodos de optimización global para la estimación de parámetros no es factible por su elevado coste computacional.

Por ello, se suele recurrir para este fin a la utilización de métodos de optimización local.

Dentro de los métodos de optimización local, se tienen los métodos que hacen uso de la derivada de la función objetivo, que suelen tener una convergencia rápida. Ejemplos de este tipo de métodos son el método del mayor descenso (*steepest descent*) y el método de Newton [31]. Al hacer falta poder evaluar la derivada de la función objetivo, es difícil utilizar este tipo de métodos para la estimación de parámetros de un modelo de simulación que esté implementado en un programa de ordenador más o menos complejo. Para este fin será más adecuado utilizar métodos de optimización local que no hacen uso de la derivada de la función objetivo. Hay distintos métodos de este tipo que se pueden revisar, por ejemplo en [9].

Para la estimación de parámetros de los modelos LEACHM y EU-Rotate_N se ha elegido el método de Nelder y Mead [47], que es un método de búsqueda sencillo y de fácil implementación que no necesita evaluar la derivada de la función objetivo.

3.4.1 Método de Nelder y Mead

El algoritmo de Nelder y Mead (símplice de Nelder-Mead o símplice no-lineal) es un algoritmo heurístico propuesto por John Nelder y Roger Mead en 1965 para la optimización de funciones objetivo sin restricciones que sólo usa valores de la función, no de su derivada. Es un método de búsqueda de mínimos de cualquier función n -dimensional, es un método numérico para minimizar una función objetivo en un espacio multidimensional. Para ello, a partir de un punto inicial estimativo, el método busca en el hiperespacio paramétrico aquellos valores de estos que minimizan la función objetivo. El símplice de Nelder-Mead se basa en fundamentos geométricos; a partir de la estimación inicial y conocidos el número de parámetros a optimizar, n el algoritmo construye el poliedro más sencillo en ese hiperespacio paramétrico; el poliedro posee $n + 1$ vértices donde se evalúa la función objetivo y se decide que nuevos valores de los parámetros se ajustarán mejor al objetivo prefijado.

Algunas de las ventajas del método símplice son las siguientes: Es un método heurístico, Se basa en consideraciones geométricas y no requiere el uso de derivadas de la función objetivo, Se puede usar con funciones objetivo muy sinuosas pues en las primeras iteraciones busca el mínimo más ampliamente y evita caer en mínimos locales fácilmente. Es fácil de implementar y usar y, sin embargo, tiene una alta eficacia.

Por otra parte como desventaja podemos enunciar el hecho de que converge más lentamente que otros métodos pues requiere mayor número de iteraciones.

El método de Nelder-Mead es un algoritmo de búsqueda directa que compara valores funcionales; los valores de la función objetivo son tomados en un conjunto de puntos muestreados (símplices) y son usados para continuar el proceso.

En el análisis de este algoritmo utilizaremos el siguiente concepto: Definimos sím-plice n -dimensional como una figura geométrica en dimensión n de volumen no nulo, que es la envolvente convexa de $n + 1$ puntos. Esto es, dados los puntos a_1, a_2, \dots, a_{n+1} , el sím-plice será,

$$\Delta = \{x \in \mathbb{R}^n / x = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i a_i; 0 \leq i \leq n + 1; 0 \leq \lambda_i \leq 1; \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i = 1\} \quad (3.14)$$

Si trabajamos en un espacio bidimensional, y dados tres puntos cualesquiera, el sím-plice será un triángulo de vértices dichos puntos.

Cada iteración de este método comienza con un sím-plice, especificado por sus $n + 1$ vértices y los valores de la función asociados. Tras calcular uno o más puntos de prueba y evaluar la función en dichos puntos, la iteración dará como resultado un nuevo sím-plice, de tal manera que los valores de la función en los vértices satisfagan de alguna forma una condición de descenso con respecto al sím-plice anterior.

Implementación del algoritmo

Consideramos el caso n -dimensional. El funcionamiento de este algoritmo se basa en la construcción de una sucesión de sím-plices para aproximarse al punto óptimo.

Para definir de forma completa el método deben especificarse cuatro parámetros:

ρ = Coeficiente de reflexión,

χ = Coeficiente de expansión,

γ = Coeficiente de contracción,

σ = Coeficiente de encogimiento o reducción (shrink).

De acuerdo con el ensayo original de Nelder-Mead, estos parámetros deben satisfacer: $\rho > 0$; $\chi > 1$; $0 < \gamma < 1$; $0 < \sigma < 1$. si bien, los valores más populares son los siguientes: $\rho = 1$; $\chi = 2$; $\gamma = \frac{1}{2}$; $\sigma = \frac{1}{2}$.

Al principio de la iteración k , disponemos de un sím-plice no degenerado Δ_k , que viene dado por sus $(n + 1)$ vértices, cada uno de los cuales es un punto de \mathbb{R}^n . La iteración k empezará ordenando y etiquetando estos vértices como, x_1, x_2, \dots, x_{n+1} de tal manera que, $f_1 \leq f_2 \leq \dots f_{n+1}$, donde $f_i = f(x_i)$.

La iteración genera $(n + 1)$ vértices que definen un nuevo simplece diferente para la próxima iteración, esto es $\Delta_{k+1} \neq \Delta_k$. Como buscamos minimizar f , nos referiremos a x_1 como el mejor vértice y a x_{n+1} como el peor. Una vez ordenados los puntos, nos plantearemos distintos casos:

a- Reflexión: Se calcula el punto de reflexión

$$x_r = \bar{x} + \rho(\bar{x} - x_{n+1}) = (1 + \rho)\bar{x} - \rho x_{n+1}$$

donde $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ es el centroide de los n mejores puntos del simplece de la iteración actual. Si a continuación evaluamos $f_r = f(x_r)$ tenemos que. Si $f_1 \leq f_r < f_n$, aceptamos el punto reflejado x_r y termina la iteración.

b- Expansión: Si $f_r < f_1$, calculamos el punto de expansión

$$x_e = \bar{x} + \chi(x_r - \bar{x}) = \bar{x} + \rho\chi(\bar{x} - x_{n+1}) = (1 + \rho\chi)\bar{x} - \rho\chi x_{n+1}$$

y evaluamos $f_e = f(x_e)$. Si $f_e < f_r$, aceptamos x_e y finaliza la iteración; en otro caso aceptamos x_r y termina la iteración.

c- Contracción: Si $f_r \geq f_n$, se realiza una contracción entre \bar{x} y el mejor punto de entre x_r y x_{n+1} . La contracción puede ser hacia dentro o hacia fuera:

c.1- Contracción hacia fuera: Tiene lugar cuando $f_n \leq f_r < f_{n+1}$, esto es, cuando, x_r es estrictamente mejor que x_{n+1} . Calculamos

$$x_c = \bar{x} + \gamma(x_r - \bar{x}) = \bar{x} + \rho\gamma(\bar{x} - x_{n+1}) = (1 + \rho\gamma)\bar{x} - \rho\gamma x_{n+1}$$

y evaluamos $f_c = f(x_c)$. Si $f_c \leq f_r$, aceptamos x_c y finaliza la iteración; en otro caso usamos shrink.

c.2- Contracción hacia dentro: Tiene lugar cuando $f_r \geq f_{n+1}$. Calculamos

$$x_{cc} = \bar{x} - \gamma(\bar{x} - x_{n+1}) = (1 - \gamma)\bar{x} + \gamma x_{n+1}$$

y evaluamos $f_{cc} = f(x_{cc})$. Si $f_{cc} < f_{n+1}$, aceptamos x_{cc} y finaliza la iteración; en otro usamos shrink.

d- shrink: Se evalúa f en los puntos $y_i = x_1 + \sigma(x_i - x_1)$, con $i = 2, \dots, n + 1$. Los vértices (desordenados) para la próxima iteración serán x_1, y_2, \dots, y_{n+1} .

Particularizamos el método para el caso bidimensional. Como ya comentamos con anterioridad, en dos dimensiones el simplece de tres puntos es el triángulo de vértices de dichos puntos. Haremos un cambio de notación y alguna transformación con respecto al caso n -dimensional con el fin de simplificar la descripción del método

que no es más que una particularización del caso n -dimensional. Explicaremos el funcionamiento del algoritmo para una iteración cualquiera.

En el algoritmo, los tres vértices x_1, x_2, x_3 de cada símplice (triángulo), son ordenados según el valor que toma la función objetivo en cada uno de ellos, $f(x_1) \leq f(x_2) \leq f(x_3)$ y el peor vértice, en este caso x_3 , es reemplazado por un nuevo punto de la forma

$$x(\nu) = (1 + \nu)\bar{x} + \nu x_3,$$

donde \bar{x} es el centroide de la envolvente convexa del conjunto $\{x_1, x_2\}$, esto es, el punto medio del segmento formado por ambos puntos. El valor de ν se selecciona de la secuencia $-1 < \nu_d < 0 < \nu_c < \nu_b < \nu_a$ (los valores típicos de estos parámetros son $\nu_d = -05$, $\nu_c = 05$, $\nu_b = 1$, $\nu_a = 2$) mediante las reglas mostradas en el siguiente algoritmo:

Mientras $f(x_3) - f(x_1)$ no sea lo suficientemente pequeño, calcularemos $x(\nu_b)$ y $f_b = f(x(\nu_b))$. Así tendremos que:

- a- Si $f_b < f(x_1)$, calcularemos $f_a = f(x(\nu_a))$. Si $f_a < f_b$, sustituiremos x_3 por $x(\nu_a)$; de no ser así, sustituiremos x_3 por $x(\nu_b)$.
- b- Si $f(x_1) \leq f_b < f(x_2)$, sustituiremos x_3 por $x(\nu_b)$ e iremos a evaluar la función en los nuevos vértices y ordenarlos nuevamente según los valores obtenidos.
- c- Si $f(x_2) \leq f_b < f(x_3)$, calculamos $f_c = f(x(\nu_c))$. Si $f_c \leq f_b$, sustituiremos x_3 por $x(\nu_c)$ y procedemos a evaluar la función en los nuevos vértices y ordenarlos nuevamente según los valores obtenidos. En otro caso asignamos

$$x_2 = x_1 + \frac{(x_2 - x_1)}{2}$$

y

$$x_3 = x_1 + \frac{(x_3 - x_1)}{2}.$$

- d- Si $f(x_3) \leq f_b$, calcularemos $f_d = f(x(\nu_d))$. Si $f_d \leq f(x_3)$, sustituiremos x_3 por $x(\nu_d)$ y Evaluamos la función en los nuevos vértices y ordenarlos nuevamente según los valores obtenidos; en otro caso asignamos

$$x_2 = x_1 + \frac{(x_2 - x_1)}{2}$$

y

$$x_3 = x_1 + \frac{(x_3 - x_1)}{2}.$$

e- Asignar

$$x_2 = x_1 + \frac{(x_2 - x_1)}{2}$$

y

$$x_3 = x_1 + \frac{(x_3 - x_1)}{2}.$$

f- Evaluar la función en los nuevos vértices y ordenarlos nuevamente según los valores obtenidos.

Resumiendo, la etapa **a)** expande el triángulo; la **b)** refleja el peor vértice; los pasos **c)** y **d)** reducen la superficie del triángulo modificando tan sólo el peor vértice y el paso **e)** reduce el área contrayendo los dos peores vértices. Algunos pasos del algoritmo en el caso bidimensional se muestran en la Figura 3.1.

Si bien el algoritmo Nelder y Mead no garantiza la convergencia en el caso general, puesto que puede estancarse en un punto no óptimo, en la práctica este método presenta unas buenas propiedades de convergencia para dimensiones bajas.

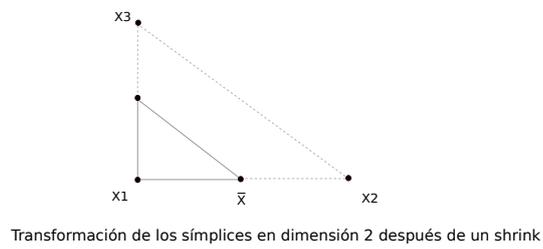
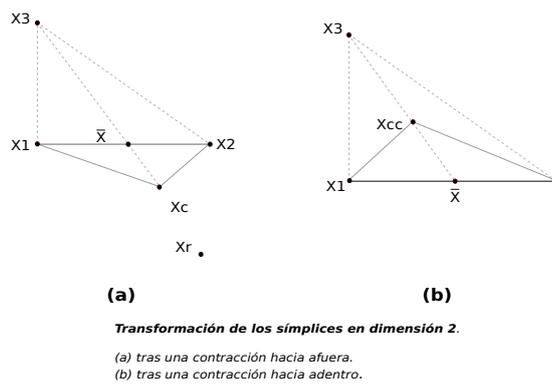
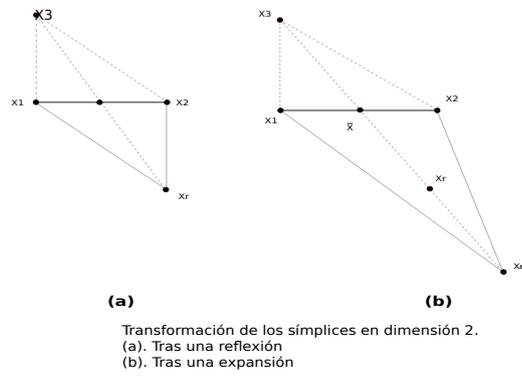


Figura 3.1: Distintos pasos del método de Nelder y Mead en el caso bidimensional

Capítulo 4

Calibración de los modelos en un cultivo de coliflor

En este capítulo, primero se presentan las parcelas de un cultivo de coliflor donde se han recogido los datos experimentales, detallando las características principales de las mismas y el tipo de variables que se han medido. Posteriormente, se desarrolla la metodología seguida para el calibrado de los dos modelos de transporte de agua y nitrógeno en el suelo que se han estudiado, el LEACHM y el EU-Rotate_N. Por último, se evalúa la capacidad predictiva de los modelos una vez calibrados considerando la mejor configuración obtenida para los valores de los parámetros del modelo.

4.1 Ensayos de fertilización nitrogenada en cultivo de coliflor

Los datos utilizados para calibrar y validar los dos modelos de simulación se obtuvieron de dos ensayos de fertilización llevados a cabo en dos plantaciones comerciales de coliflor en el término municipal de Paterna (Valencia, $39^{\circ} 29' 32.12''$ N y $0^{\circ} 26' 21.19''$ W, 14 metros sobre el nivel del mar), entre los años 2012 y 2014. Estos ensayos se realizaron en el marco de una colaboración entre el Instituto Valenciano de Investigaciones Agrarias y la Universidad Politécnica de Valencia dentro del proyecto RTA2011-00136-C04-01 “Integración de medidas de suelo, planta y modelos de simulación para el manejo eficiente del nitrógeno en los cultivos hortícolas”.

Los objetivos de estos ensayos fueron:

1. Determinar las necesidades de N mineral disponible en el cultivo.

Tabla 4.1: Principales características del suelo de la parcela experimental Paterna-1

Profund. cm	Arena %	Limo %	Arcilla %	Dap $g\ cm^{-3}$	pH	Mat. org. %	Textura
0 - 30	27	43	29	1.29	7.7	2.45	Franco arcillosa
30 - 60	18	42	40	1.60	8.0	0.96	Arcillo limosa
60 - 90	18	41	41	1.72	8.0	0.64	Arcillo limosa

Tabla 4.2: Principales características del suelo de la parcela experimental Paterna-2

Profund. cm	Arena %	Limo %	Arcilla %	Dap $g\ cm^{-3}$	pH	Mat. org. %	Textura
0 - 30	31	38	31	1.52	7.9	1.67	Franco arcillosa
30 - 60	17	42	41	1.62	8.0	0.94	Arcillo limosa
60 - 90	23	43	34	1.77	8.1	0.61	Franco arcillosa

2. Evaluar las medidas foliares de clorofila y de concentración de nitrato en la savia de los peciolo de las hojas para el diagnóstico de la nutrición nitrogenada en este cultivo.
3. Estimación y medida de la mineralización de la materia orgánica de los suelos en la zona de L'Horta de Valencia.
4. Obtener datos para evaluar algunos modelos de simulación que puedan emplearse después en la predicción del N mineral en el suelo y en las recomendaciones de abonado.

Para la tesis se utilizaron los datos correspondientes al experimento de estimación y medida de la mineralización de la materia orgánica del suelo, que se desarrolló entre septiembre de 2012 y mayo de 2013 en la parcela 1, denominada en adelante Paterna-1, y entre septiembre de 2013 y mayo de 2014 en la parcela 2, denominada Paterna-2. En este experimento se muestreó periódicamente el suelo de 0 a 45 cm en intervalos de 15 cm. Los muestreos de suelo se realizaron durante el cultivo de la coliflor y tras el enterrado de los residuos de la cosecha, hasta el comienzo del cultivo siguiente.

El suelo es profundo, sin piedras, de textura franco arcillosa en las dos primeras capas (0-15 cm y 15-30 cm) y arcillo-limosa en la tercera capa considerada en el ensayo (30-45 cm). La materia orgánica variaba entre $35\ g\ kg^{-1}$ en la capa superficial y $16\ g\ kg^{-1}$ en las capas más profundas. La densidad aparente del suelo osciló entre $1128\ kg\ m^{-3}$ en la primera capa y $1600\ kg\ m^{-3}$ en la tercera capa. En las Tablas 4.1 y 4.2 se recogen las principales características físico-químicas del suelo de las dos parcelas del ensayo.

En la parcela Paterna-1, el 13 de agosto de 2012, antes de la plantación, se aplicaron 25 t/ha de gallinaza (3.26 % N sobre materia fresca) que se incorporaron al suelo después de la aplicación. Ésta es una práctica habitual que los agricultores realizan en la rotación de cultivos en la zona de la huerta de Valencia. La plantación de la coliflor se realizó el día 17 de septiembre de 2012, con una separación entre hileras de 0.64 m y una separación entre plantas de 0.67 m, lo que supuso una densidad de plantación de 23420 plantas ha⁻¹. La variedad utilizada fue Triomphant, que es una variedad de ciclo largo (180 a 190 días). Se caracteriza por ser una variedad vigorosa, con pella muy blanca, compacta y bien cubierta. La coliflor se cosechó el 20 de febrero de 2013 y la producción comercial fue de unas 41.9 t ha⁻¹.

En la parcela Paterna-2 también se aplicó una enmienda orgánica a base de gallinaza, con fecha el 15 de julio de 2013 y una dosis de 24 t ha⁻¹ (2.78 % N sobre materia fresca), que fue incorporada al suelo después de la aplicación. La plantación de la coliflor (variedad Triomphant) se realizó el día 16 de septiembre de 2013 con una separación entre hileras de 0.64 m y una separación entre plantas de 0.74 m, lo que supuso una densidad de plantación de 21143 plantas ha⁻¹. La coliflor se cosechó el 15 de febrero de 2014 y la producción comercial fue en este caso de 33.7 t ha⁻¹.

En ambos casos el riego fue por surcos utilizando agua del río Turia y la lámina de agua aplicada fue medida en cada riego. De cada riego se tomaron dos muestras de agua (al inicio y al final del riego) y, posteriormente, en el laboratorio se analizó el contenido en nitrato, amonio y cloruro del agua de riego. En la Figura 4.1 se muestra la lámina mensual aplicada en los dos ensayos y en la Tabla 4.3 la fecha y lámina de cada uno de los riegos aplicados en los períodos utilizados en la simulación.

Los datos meteorológicos, necesarios en ambos modelos, fueron recogidos de la estación meteorológica de Manises, situada a menos de dos kilómetros de las parcelas. En la Figura 4.2 se muestra la temperatura media mensual en el período del ensayo, la cual osciló entre 10.6°C y 26.5°C.

La precipitación fue muy diferente en los dos períodos estudiados, siendo el segundo mucho más seco que el primero, lo que explica el mayor número de riegos efectuados por el agricultor en este segundo año. Así, en el período anual comprendido entre septiembre de 2012 y agosto de 2013, la precipitación fue de 527 mm, mientras que entre septiembre de 2013 y agosto de 2014 la lluvia total registrada fue tan sólo de 99 mm. En la Figura 4.3 se muestra la precipitación mensual durante el ensayo. A destacar la precipitación registrada el 28 de septiembre de 2012, recién plantada la coliflor de Paterna-1, de 147 mm, y que provocó importante escorrentía superficial. Se recogieron muestras de agua de lluvia que fueron analizadas para obtener la concentración de nitrato y amonio y calcular los aportes de N con el agua de lluvia.

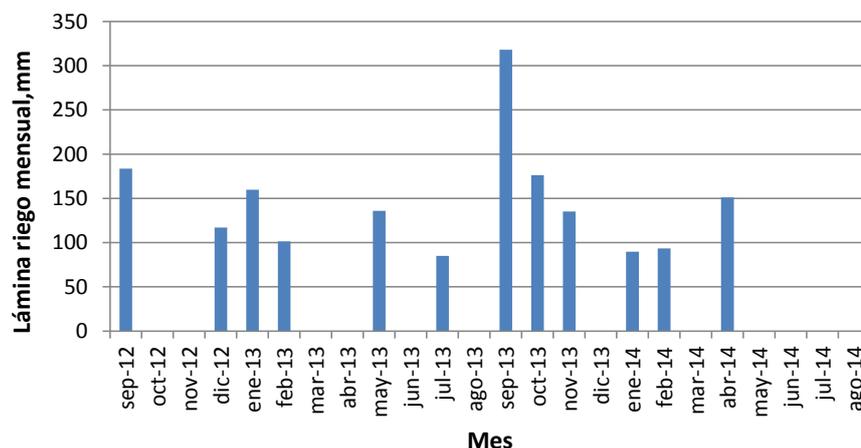


Figura 4.1: Agua aplicada por riego mensualmente a lo largo del período del ensayo

Tabla 4.3: Riegos aplicados en cada una de las parcelas durante el período del ensayo

Parcela	Fecha	Origen	Lámina (mm)
Paterna-1	17-09-12	Acequia	183.6
	10-12-12	Acequia	117.0
	07-01-13	Acequia	79.4
	21-01-13	Acequia	80.4
	04-02-13	Acequia	101.5
	06-05-13	Acequia	135.9
Paterna-2	08-07-13	Acequia	84.9
	02-09-13	Acequia	146.0
	16-09-13	Acequia	110.3
	23-09-13	Acequia	61.7
	07-10-13	Acequia	77.0
	28-10-13	Acequia	99.1
	11-11-13	Acequia	67.3
	25-11-13	Acequia	67.8
	06-01-14	Acequia	89.6
	03-02-14	Acequia	93.5
14-04-14	Acequia	151.0	

4.1 Ensayos de fertilización nitrogenada en cultivo de coliflor

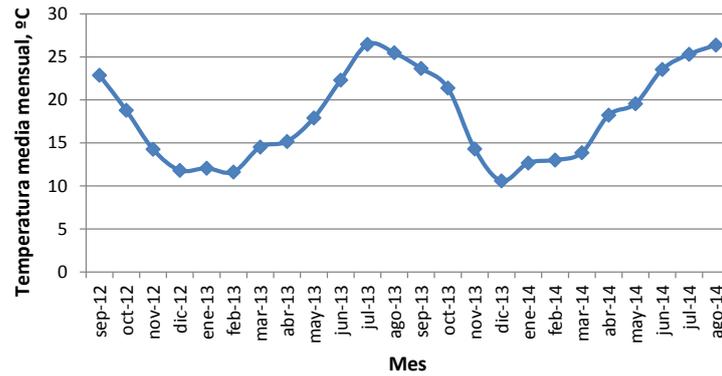


Figura 4.2: Temperatura media mensual en el período 01/09/2012 - 01/09/2014

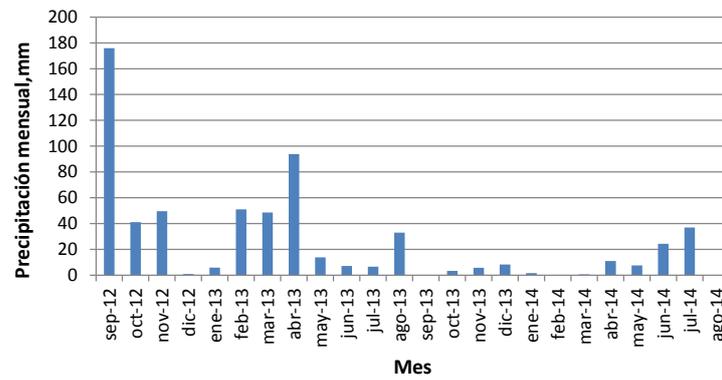


Figura 4.3: Precipitación mensual en el período 01/09/2012 - 01/09/2014

Por otra parte, la evapotranspiración potencial mensual osciló entre los 39.2 mm de diciembre de 2013 y los 178.6 mm de julio del mismo año, lo que suponen entre 1.3 y 5.8 mm/día de evapotranspiración media diaria. En la Figura 4.4 se muestra la evapotranspiración mensual a lo largo del período de ensayo.

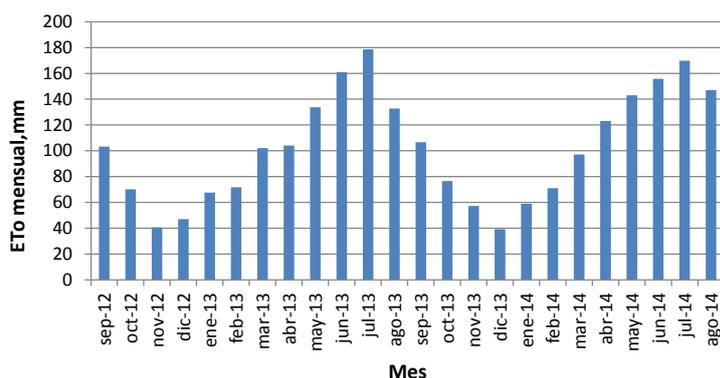


Figura 4.4: Evapotranspiración potencial mensual en el período 01/09/2012 - 01/09/2014

En cada parcela se tomaron muestras de suelo a tres profundidades: 0-15 cm, 15-30 cm y 30-45 cm. Los muestreos tuvieron una periodicidad de 15-21 días dependiendo de la época y se prolongaron hasta el inicio del siguiente cultivo. En la Tabla 4.4 se muestran las fechas de los muestreos de suelo. En cada muestra se determinó, entre otras variables, la humedad gravimétrica del suelo mediante secado del suelo a 105°C, el contenido de nitrato y amonio, mediante extracción en KCl 2M y posterior determinación colorimétrica mediante análisis por inyección de flujo. También se realizaron muestreos de planta a lo largo del cultivo y se analizó por el grupo del IVIA el contenido de nitrógeno en dicho material vegetal.

El abonado nitrogenado en la zona experimental de la parcela Paterna-1 utilizada en la simulación fue de 100 kg N y se aportó el 29 de octubre de 2012, mientras que en la zona de la parcela Paterna-2 se aplicaron 100 kg N el 13 de octubre de 2013. En ambos casos la forma química utilizada fue sulfato amónico.

En la Figura 4.5 se muestra un detalle de la parcela Paterna-1 unas semanas después de la plantación.

Tabla 4.4: Fechas de muestreo de suelo en cada una de las parcelas

Parcela	Fecha	Parcela	Fecha
Paterna-1	03/09/2012	Paterna-2	10/09/2013
	08/10/2012		20/09/2013
	24/10/2012		23/09/2013
	05/11/2012		30/09/2013
	21/11/2012		04/10/2013
	03/12/2012		24/10/2013
	18/12/2012		22/11/2013
	15/01/2013		27/12/2013
	01/02/2013		24/01/2014
	21/02/2013		21/02/2014
	21/03/2013		04/03/2014
	27/03/2013		20/03/2014
	03/04/2013		01/04/2014
	11/04/2013		24/04/2014
	18/04/2013		15/05/2014
	03/05/2013		
	13/05/2013		
30/05/2013			



Figura 4.5: Plantación del cultivo de coliflor en una parcela en Paterna, Valencia, España

4.2 Calibración de los modelos de transporte de agua y nitrógeno en Paterna-1

Como ya se ha comentado, el primer paso para la calibración de los modelos consiste en realizar un análisis de sensibilidad de la función error, definida a partir de las salidas de los modelos y los datos experimentales, para determinar que parámetros relacionados con el contenido de agua y nitrógeno en el suelo tienen mayor o menor influencia sobre las variables de salida de los modelos consideradas, esto es, la evolución en el tiempo de la humedad volumétrica en las diferentes capas del perfil de suelo y del nitrógeno mineral en cada una de las capas. Estas variables han sido predichas por los modelos LEACHN y EU-Rotate_N.

El análisis se ha realizado en dos etapas; puesto que el contenido del agua en el suelo no depende directamente del contenido de nitrógeno y, además, su movimiento condiciona algunos procesos importantes del ciclo del nitrógeno como la lixiviación o los procesos de transformación, se ha decidido, en primer lugar, calibrar los parámetros más importantes en la dinámica del agua en el suelo. En segundo lugar, se calibran los parámetros relacionados con el ciclo del nitrógeno, con los parámetros del agua ya fijados.

Para determinar los parámetros más importantes de la dinámica del agua, se ha realizado un análisis de sensibilidad teniendo en cuenta los parámetros que se muestran en la Tabla 4.5, suponiendo que estos parámetros se distribuyen uniformemente en los rangos de variación que se recogen en esta misma Tabla.

Para simular el flujo de agua en el modelo LEACHM, se utilizan las relaciones funcionales entre el contenido de agua θ , el potencial matricial φ , y la conductividad hidráulica, k , propuestas por Campbell. Por ello, los parámetros seleccionados para el análisis de sensibilidad han sido los parámetros a y b de Campbell y la conductividad hidráulica saturada, que coinciden con los parámetros más sensibles descritos en [30]. Los valores máximos y mínimos seleccionados para estos parámetros son similares a los que se presentan en dicho trabajo. Conclusiones similares se obtuvieron en el estudio presentado en [50].

Los principales parámetros hidráulicos utilizados por el modelo EU-Rotate_N, son los contenidos volumétricos de humedad a capacidad de campo (FC), en el punto de marchitez permanente, y a saturación (SAT). Otros parámetros relacionados con la dinámica del agua en el suelo son el espesor de la capa de evaporación y el agua fácilmente evaporable, éste último definido en función de la textura del suelo. Otro parámetro hidráulico que emplea el modelo es el denominado coeficiente de drenaje (CD), que regula la velocidad de transporte del agua entre las capas del suelo. De todos estos parámetros los más influyentes, para un cultivo de regadío, son las humedades volumétricas a capacidad de campo (FC), la humedad volumétrica a saturación (SAT) y el coeficiente de drenaje (CD) [35]. Los valores

Tabla 4.5: Parámetros hidráulicos evaluados en cada uno de los modelos

Parámetro	Símbolo	Unidades	V. inferior	V. superior
Modelo LEACHM				
Parámetro a ec. Campbell (0-15)	$a1$	kPa	-0.149	-10.000
Exponente b ec. Campbell (0-15)	$b1$	-	0.140	10.000
Conductividad hidráulica sat. (0-15)	$k1$	mm/día	1	1000
Parámetro a ec. Campbell (15-30)	$a2$	kPa	-0.149	-10.000
Exponente b ec. Campbell (15-30)	$b2$	-	0.140	20.000
Conductividad hidráulica sat. (15-30)	$k2$	mm/día	1	500
Parámetro a ec. Campbell (30-45)	$a3$	kPa	-0.149	-10.000
Exponente b ec. Campbell (30-45)	$b3$	-	0.140	25.000
Conductividad hidráulica sat.(30-45)	$k3$	mm/día	1	150
Modelo EU-Rotate_N				
Humedad a capacidad de campo (0-15)	$FC1$	cm ³ /cm ³	0.150	0.350
Humedad de saturación (0-15)	$SAT1$	cm ³ /cm ³	0.400	0.550
Coefficiente de drenaje (0-15)	$CD1$	-	0.100	1.000
Humedad a capacidad de campo (15-30)	$FC2$	cm ³ /cm ³	0.150	0.300
Humedad de saturación (15-30)	$SAT2$	cm ³ /cm ³	0.400	0.470
Coefficiente de drenaje (15-30)	$CD2$	-	0.100	1.000
Humedad a capacidad de campo (30-45)	$FC3$	cm ³ /cm ³	0.150	0.300
Humedad de saturación (30-45)	$SAT3$	cm ³ /cm ³	0.350	0.400
Coefficiente de drenaje (30-45)	$CD3$	-	0.100	1.000

Tabla 4.6: Parámetros del ciclo del nitrógeno evaluados en cada uno de los modelos

Parámetro	Símbolo	Unidades	V. inferior	V. superior
Modelo LEACHM				
Coefficiente adsorción N-NH ₄	N1	L/kg	0.975	9.000
Coefficiente difusión molecular	N2	mm ² /d	17	166
Factor de eficiencia de síntesis	N3	-	0.5	0.7
Frac. de humificación	N4	-	0.2	0.462
Tasa de nitrificación capa 1	N5	d ⁻¹	9.2×10 ⁻⁴	1.5
Tasa de desnitrificación capa 1	N6	d ⁻¹	2.0×10 ⁻⁵	0.12
Tasa de mineraliz. humus capa1	N7	d ⁻¹	7.5×10 ⁻⁵	1.1×10 ⁻⁴
Tasa de mineraliz. humus capa2	N8	d ⁻¹	7.5×10 ⁻⁵	1.1×10 ⁻⁴
Tasa de mineraliz. humus capa3	N9	d ⁻¹	7.5×10 ⁻⁵	1.1×10 ⁻⁴
Tasa de mineraliz. residuos capa1	N10	d ⁻¹	1.5×10 ⁻²	0.15
Tasa de mineraliz. residuos capa2	N11	d ⁻¹	1.5×10 ⁻²	0.15
Tasa de mineraliz. residuos capa3	N12	d ⁻¹	1.5×10 ⁻²	0.15
Tasa de mineraliz. enmienda orgánica	N13	d ⁻¹	1.0×10 ⁻³	0.01
Modelo EU-Rotate_N				
Tasa descomp. MO fracción no lábil	N1	d ⁻¹	1.0×10 ⁻⁶	8.6×10 ⁻⁵
Tasa descomp. MO fracción lábil	N2	d ⁻¹	1.0×10 ⁻⁶	2.8×10 ⁻⁴
Tasa renovación SMB fracción no lábil	N3	d ⁻¹	1.0×10 ⁻⁶	2.0×10 ⁻³
Tasa renovación SMB fracción lábil	N4	d ⁻¹	1.0×10 ⁻⁶	2.0×10 ⁻²
Tasa decaimiento SMB fracción no lábil	N5	d ⁻¹	1.0×10 ⁻⁶	2.0×10 ⁻³
Tasa decaimiento SMB fracción lábil	N6	d ⁻¹	1.0×10 ⁻⁶	2.0×10 ⁻²
Factor de eficiencia SMB	N7	-	0.4	0.8
Factor de eficiencia MO fracción no lábil	N8	-	0.2	0.6
Factor de eficiencia MO fracción lábil	N9	-	0.3	0.7
Tasa de nitrificación	N10	d ⁻¹	1.0×10 ⁻⁶	2.0×10 ⁻²
Tasa descomp. residuos fracción lábil	N11	d ⁻¹	1.0×10 ⁻⁴	0.10
Fracción lábil de residuos	N12	-	0.55	0.75
Índice de cosecha	N13	-	0.35	0.50

máximos y mínimos para los parámetros *FC* y *SAT* de las distintas capas se obtuvieron a partir de las expresiones de Saxton y colaboradores [65], dependiendo del rango de textura del suelo de cada una de las capas. Para el coeficiente de drenaje se recomienda un valor central de 0.5 [35] y se ha supuesto un rango de variación entre 0 y 1.

Una vez se determinan los parámetros más importantes relacionados con la dinámica del agua, se procede a un proceso de optimización para determinar el valor óptimo de estos parámetros más sensibles para cada una de las parcelas. Los resultados obtenidos se presentarán en las secciones siguientes. Con los parámetros del agua calibrados, se realiza un análisis de sensibilidad para determinar qué parámetros relacionados con el ciclo del nitrógeno son los más importantes. En particular, se han considerado los parámetros y los rangos de variación que se presentan en la Tabla 4.6, suponiendo también que estos parámetros se distribuyen uniformemente en su rango de variación.

En cuanto a los parámetros del nitrógeno, para el modelo LEACHM, los parámetros seleccionados han sido, esencialmente, los relacionados con las transformaciones del nitrógeno en el suelo. En concreto, las tasas de mineralización, tanto de la materia orgánica del suelo (humus) como las de los residuos y la enmienda orgánica aplicada. Este grupo de parámetros coinciden con los parámetros más sensibles analizados en las referencias [30], y [69]. Los rangos de variación de los parámetros del nitrógeno en el modelo LEACHM fueron, esencialmente, los propuestos en [30].

Si bien el modelo EU-Rotate_N simula el ciclo del nitrógeno de forma un tanto diferente, en cuanto al número de compartimentos, las transformaciones del nitrógeno en el suelo consideradas son similares a las que modeliza LEACHN. Por ello, se han seleccionado para su análisis los parámetros asociados a los mismos procesos que se han considerado en el modelo LEACHM. De este modo, se han seleccionado las tasas de descomposición de la materia orgánica en el suelo, los factores de eficiencia, la tasa de nitrificación y las tasas de descomposición de los residuos. Para definir un rango de variación posible para los parámetros asociados a la descomposición de la materia orgánica del suelo y los factores de eficiencia, se tuvieron en cuenta los valores recomendados por el modelo, situando el valor recomendado en el punto medio del intervalo de variación. El valor central de la tasa de descomposición de los restos de cosecha se obtuvo a partir de las medidas obtenidas en ensayos de incubación en laboratorio [17].

Para medir la bondad del proceso de calibración de forma cuantitativa, se han utilizado distintos estadísticos [37]. Estos estadísticos se presentan a continuación.

La diferencia media de los datos observados frente a los simulados (dif. media) se define como

$$\text{dif. media} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i) , \quad (4.1)$$

donde O_i son los valores observados y S_i los valores simulados en el análisis. Cuando la diferencia media es positiva indica que el modelo subestima las predicciones de la variable estudiada, y cuando es negativa indica que las sobreestima. La interpretación de este estadístico es muy simple y puede ser útil en la identificación de las tendencias en las predicciones del modelo y en la posible mejora del mismo. Sin embargo, su valor no es suficiente para determinar el error de un modelo ya que valores cercanos a cero pueden ser consecuencia, tanto de pequeñas diferencias entre valores observados y simulados, como de grandes diferencias producidas en ambas direcciones (valores negativos y positivos).

La raíz cuadrada del error cuadrático medio (RMSE) se define como

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2} . \quad (4.2)$$

Este estadístico elimina el problema de compensación entre las predicciones sobre e infra estimadas. Una de las ventajas que ofrece el RMSE es que tiene las mismas unidades que los valores observados y simulados, siendo fácil su interpretación. Las grandes diferencias entre valores observados y simulados contribuyen más al valor, teniendo un mayor peso en el estadístico. El error puede separarse en las diferentes contribuciones de cada observación e identificar así las posibles fuentes de errores.

La raíz del error cuadrático medio relativo normalizada se define como

$$\text{NRMSE} = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}}{\bar{O}} \quad (4.3)$$

El NRMSE se obtiene dividiendo el RMSE entre la media de los valores observados. Una característica de este estadístico es que es independiente de las unidades de medida de los datos observados y simulados y puede ser útil para comparar diferentes series de datos. El valor mínimo para este estadístico es cero, siendo también el valor óptimo en una evaluación de la predicción de un modelo.

El coeficiente de determinación se define como

$$R^2 = \left(\frac{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})(S_i - \bar{S})}{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2 \right) \left(\sum_{i=1}^N (S_i - \bar{S})^2 \right)}} \right)^2 \quad (4.4)$$

y es el cuadrado del coeficiente de correlación de la recta de regresión entre los valores observados y los simulados. Cuantifica la proporción de la varianza de los datos observados que puede ser explicada por el modelo. El rango de variación del R^2 es de cero a uno (0 a 1), indicando el valor de uno (1) una relación lineal perfecta entre los valores observados y simulados. Sin embargo, esto no implica necesariamente que el modelo sea perfecto ya que es insensible a las diferencias proporcionales y aditivas entre valores observados y simulados. También es interesante conocer la pendiente y la ordenada en el origen de la recta de regresión entre los valores observados y simulados.

Por último, el índice de concordancia se define como

$$d = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - S_i)^2}{\left(\sum_{i=1}^N (|S_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|) \right)^2} \quad (4.5)$$

Este estadístico, que fue propuesto por Willmott [79], es conceptualmente similar al coeficiente de eficiencia propuesto por Nash y Sutcliffe [45], y su valor puede variar entre cero y uno (0 y 1). Sigue teniendo el problema de que es más sensible a los puntos extremos que a los que están cercanos a la media. Un valor igual a uno (1) indica que el modelo es perfecto y si es igual a cero (0), el modelo simula un mismo valor similar a la media observada para todos los casos, no siendo mejor estimador que la media.

4.2.1 Calibración de los parámetros hidráulicos

En primer lugar, se calibrarán los parámetros que mayor influencia tienen en la dinámica del agua en el suelo, tanto en el modelo LEACHM como en el modelo EU-Rotate_N, ya que el tener bien simulado el comportamiento del agua en el suelo, en parcelas de regadío, es fundamental para poder abordar la simulación de los ciclos biogeoquímicos en el suelo, en este caso el del nitrógeno. La cantidad de agua del suelo influencia multitud de procesos, como el crecimiento de las plantas, la aireación y la temperatura del suelo o su consistencia [41]. También determina, a través del drenaje, la lixiviación de solutos, en este caso nitrato. La humedad del suelo condiciona, así mismo, la actividad microbiológica del suelo, responsable de los principales procesos de transformación en los que el nitrógeno del suelo se ve implicado. Para realizar esta calibración es conveniente conocer que parámetros, de los seleccionados en cada modelo, son los que más influencia tienen sobre la variable medida, en este caso la humedad volumétrica del suelo. Para ello se utilizará el análisis de sensibilidad global, que permite evaluar el efecto de cada parámetro sobre la respuesta del modelo, explorando los intervalos de variación posible de todos los parámetros seleccionados de forma simultánea.

Análisis de sensibilidad de los parámetros hidráulicos de LEACHM

Para el análisis de sensibilidad de los parámetros más importantes relacionados con la dinámica del agua en el suelo, se utilizan los métodos LH-OAT y FAST, que se han descrito en el capítulo anterior. En este caso, los índices de sensibilidad se calcularon con los datos del ensayo de Paterna-1. En concreto, la referencia utilizada para obtener los índices de sensibilidad del error han sido las medidas de humedad volumétrica de cada una de las capas de suelo (0-15, 15-30 y 30-45 cm) en las 17 fechas en las que se disponía de datos medidos en el período simulado, que en este caso fue del 03/09/2012 al 30/05/2013. Se considera, en este caso, la

Tabla 4.7: Índices de sensibilidad (valor medio \bar{I}_i) y desviación estándar (σ) obtenidos con el método LH-OAT en Paterna-1 para los parámetros hidráulicos del modelo LEACHM

Parámetro	niveles=10		niveles=20		niveles= 50	
	I_i	σ	I_i	σ	I_i	σ
<i>a</i> 1	0.1392	0.0158	0.1355	0.0170	0.1429	0.0242
<i>b</i> 1	0.4534	0.0492	0.4487	0.0271	0.4508	0.0321
<i>k</i> 1	0.0730	0.0688	0.0661	0.0383	0.0706	0.0105
<i>a</i> 2	0.1275	0.0415	0.1244	0.0351	0.1496	0.0445
<i>b</i> 2	0.3282	0.0563	0.3318	0.0450	0.3507	0.0219
<i>k</i> 2	0.0697	0.0746	0.0485	0.0354	0.0519	0.0253
<i>a</i> 3	0.1219	0.0516	0.1200	0.0131	0.1368	0.0329
<i>b</i> 3	0.2517	0.0501	0.2501	0.0410	0.2463	0.0177
<i>k</i> 3	0.0769	0.0416	0.0717	0.0246	0.0937	0.0220

siguiente función error,

$$\varepsilon = \sum_i^{ncapas} \frac{\left(\sum_j^{nmed} (\theta_{vij} - \theta_{vij}^*)^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\sum_j^{nmed} (\theta_{vij})^2 \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (4.6)$$

donde *ncapas* es el número de capas de suelo consideradas (tres en este caso), *nmed* es el número de medias de humedad en cada capa, θ_{vij} es la medida *j*-ésima de la humedad volumétrica en la capa *i*-ésima y θ_{vij}^* es el valor *j*-ésimo de la humedad volumétrica en la capa *i*-ésima predicho por el modelo.

En el análisis de sensibilidad mediante el método LH-OAT se han realizado 5 repeticiones considerando $p = 10, 20$ y 50 niveles en el rango de variación de los parámetros. En la Tabla 4.7 se muestran la media y la desviación típica de los índices de sensibilidad obtenidas en las 5 repeticiones.

Si se ordenan los parámetros con respecto al promedio del índice de sensibilidad, se obtienen los gráficos mostrados en las Figuras 4.6, 4.7y 4.8, que permiten identificar los parámetros más importantes.

Los resultados muestran que el exponente *b* de la ecuación de Campbell para cada una de las capas de suelo, es el parámetro que más incidencia tiene sobre la humedad volumétrica del suelo, independientemente del número de niveles ensayados. Esta constante no tiene un significado físico, siendo un parámetro de ajuste

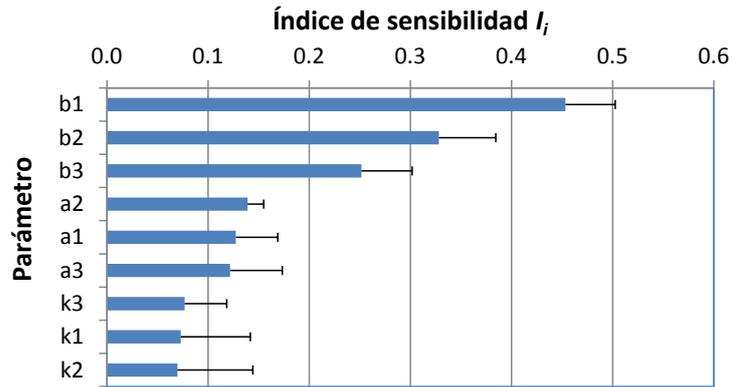


Figura 4.6: Índices de sensibilidad de los parámetros hidráulicos del modelo LEACHM usando $p = 10$ niveles en Paterna-1. Las barras representan el valor de σ ($n=5$)

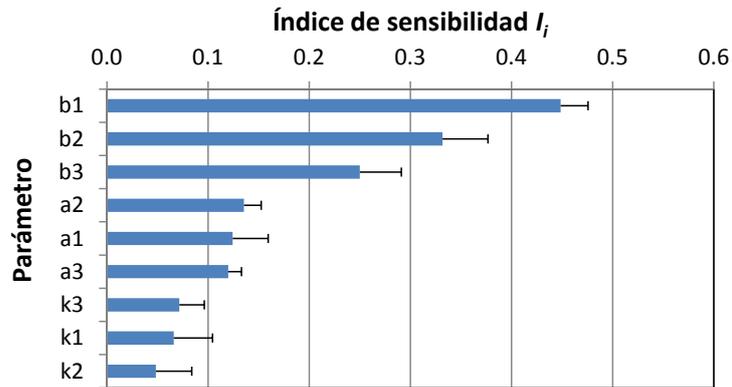


Figura 4.7: Índices de sensibilidad de los parámetros hidráulicos del modelo LEACHM usando $p = 20$ niveles en Paterna-1. Las barras representan el valor de σ ($n=5$)

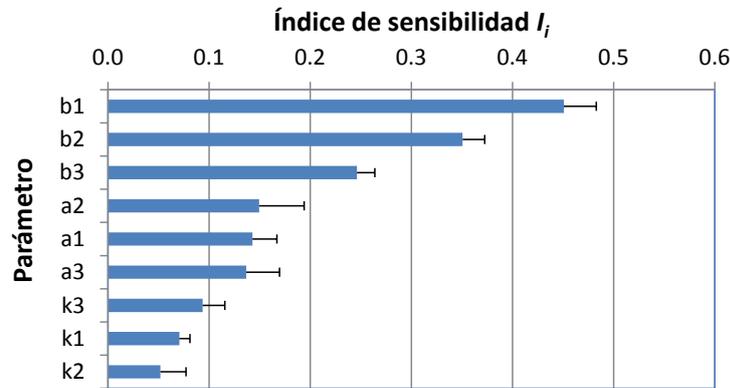


Figura 4.8: Índices de sensibilidad de los parámetros hidráulicos del modelo LEACHM usando $p = 50$ niveles en Paterna-1. Las barras representan el valor de σ ($n=5$)

tanto en la ecuación de retención como en la de conductividad. Los cambios en la constante b tienen incidencia en la curva característica de humedad fundamentalmente cuando el suelo está muy seco (potenciales matriciales muy negativos), sin embargo, para potenciales próximos a la saturación los cambios en el parámetro afectan mucho menos a la relación potencial matricial–humedad volumétrica. Al intervenir también en la ecuación que establece la relación potencial matricial–conductividad hidráulica, este parámetro tiene incidencia también en el proceso de secado del suelo, proceso importante en el cultivo de regadío, donde el suelo se va secando tras el riego hasta la siguiente aplicación, como consecuencia de la evapotranspiración o el drenaje profundo.

Le sigue en importancia el parámetro a de la mencionada ecuación, el cual ha sido considerado como el equivalente al potencial de entrada de aire en los poros, es decir, el potencial a partir del cual se comenzarían a vaciar los poros rellenos de agua. Este parámetro tiene una incidencia clara sobre la curva característica de humedad del suelo de forma que cuando el valor de a se hace más negativo el contenido de agua del suelo es mayor para un mismo potencial matricial. Como se señala en [50], las diferencias provocadas por los cambios introducidos en este parámetro se van atenuando conforme los valores de potencial se hacen más pequeños. Estos resultados indican que, para el caso estudiado, grandes variaciones en el parámetro a de la ecuación de Campbell, no tendrían una incidencia importante sobre el contenido de humedad en el suelo.

La conductividad hidráulica saturada, que expresa la capacidad del suelo para conducir el agua en condiciones de saturación, no parece tener incidencia alguna en las simulaciones. Este resultado pone en entredicho el uso de la conductividad

Tabla 4.8: Índices de sensibilidad para los parámetros hidráulicos del modelo LEACHM obtenidos con el método FAST para Paterna-1

Parámetro	S_i
$a1$	0.0270
$b1$	0.1867
$k1$	0.0005
$a2$	0.0031
$b2$	0.2049
$k2$	0.0020
$a3$	0.0136
$b3$	0.3651
$k3$	0.0010

hidráulica saturada como parámetro de interés para realizar simulaciones con este modelo en las circunstancias del ensayo, donde no se dispone de valores medidos de humedad de suelo cerca de la saturación, y sugiere la necesidad de utilizar como entrada en LEACHM otro valor de conductividad diferente al de saturación. En este sentido, Hutson y sus colaboradores [24], sugieren que un valor más realista sería suponer una conductividad de 1 mm/día cuando el suelo está próximo a capacidad de campo, puesto que la medida de la k_{sat} del suelo puede conducir a valores difícilmente observables en campo.

En las Figuras 4.6–4.8 se observa que el orden de importancia de los parámetros hidráulicos más importantes se mantiene al cambiar el número de niveles utilizados. En general, la desviación típica obtenida para las distintas repeticiones, disminuye al aumentar el número de niveles, obteniendo los valores de los índices de sensibilidad con menor desviación típica cuando se usan $p = 50$ niveles de los parámetros.

Se ha hecho también el análisis de sensibilidad de los parámetros hidráulicos del modelo LEACHM utilizando el método FAST. El valor de los índices de sensibilidad de primer orden, S_i , se muestran en la Tabla 4.8 y en la Figura 4.9.

Con el método FAST, siguen siendo los parámetros b de cada capa los que más influencia tienen sobre la humedad del suelo, corroborando los resultados obtenidos con el método de LH-OAT, si bien el método FAST ordena los tres primeros parámetros de forma diferente, colocando en primer lugar el de la tercera capa. Los demás parámetros tienen menor influencia sobre el contenido de agua en el suelo, y sólo los coeficientes a de la primera y tercera capa muestran alguna sensibilidad. Por ello, para la calibración del modelo hidráulico se consideran dos configuraciones: una con 3 parámetros, donde se seleccionan los parámetros $b1$, $b2$ y $b3$ para

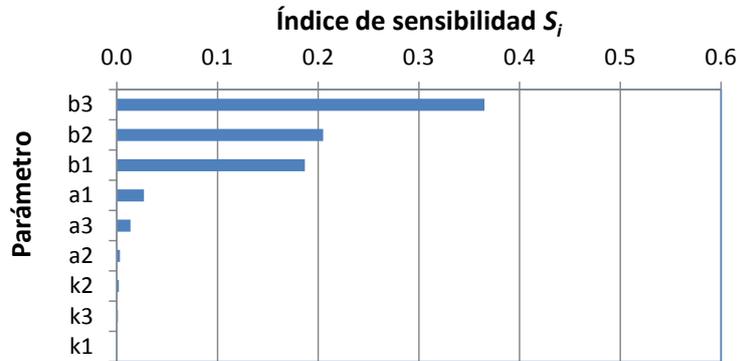


Figura 4.9: Índices de sensibilidad de primer orden de los parámetros hidráulicos del modelo LEACHM usando el método FAST en Paterna-1

el proceso de optimización, y otra de 4 parámetros, donde se seleccionan los parámetros b_1 , b_2 , b_3 y a_1 para estudiar la variación del resultado al incluir un nuevo parámetro. El resto de parámetros hidráulicos no incluidos en la optimización se han fijado al valor medio del intervalo de variación propuesto para los mismos.

Optimización del módulo hidráulico del modelo LEACHM

Utilizando los datos experimentales de humedad de suelo y la función error (4.6) que se ha utilizado para el análisis de sensibilidad, se realiza una búsqueda de los valores óptimos de los parámetros más importantes utilizando el método de Nelder y Mead, restringiendo los posibles valores al intervalo de variación establecido en la Tabla 4.5.

En la Tabla 4.9 se muestran, para las dos configuraciones estudiadas, tres y cuatro parámetros, los valores iniciales de los parámetros seleccionados, los valores óptimos obtenidos, el valor del error y el número de iteraciones necesarias en la optimización con el método de Nelder y Mead.

El resultado de la optimización supone la disminución de los valores iniciales de b considerados para las dos primeras capas, mientras que el de la tercera capa aumentó considerablemente. La disminución de b tiene como consecuencia que a un mismo potencial matricial el contenido de agua del suelo sea menor y también una menor conductividad hidráulica, lo que se traduce en menor humedad en dichas capas para un determinado potencial matricial. El aumento de b en la tercera capa supondría una mayor capacidad de retención de agua en esta capa y, por tanto, un menor drenaje. La incorporación de un nuevo parámetro en el proceso

Tabla 4.9: Valores iniciales y óptimos de los parámetros hidráulicos del modelo LEACHM considerando tres y cuatro parámetros en la optimización

Configuración de 3 parámetros				
Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>b1</i>	5.07	4.73	0.3028	47
<i>b2</i>	10.07	8.41		
<i>b3</i>	12.57	18.66		
Configuración de 4 parámetros				
Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>b1</i>	5.07	4.89	0.3059	53
<i>b2</i>	10.07	7.40		
<i>b3</i>	12.57	16.08		
<i>a1</i>	-5.075	-4.331		

de optimización, apenas modificó el error y el número de iteraciones necesarias (Tabla 4.9).

Una vez obtenido el valor óptimo de los parámetros más sensibles se procedió a efectuar la simulación del primer año del ensayo, período comprendido entre el 03/09/2012 y el 30/05/2013 utilizando para ello las dos configuraciones propuestas, la de 3 parámetros hidráulicos, y la configuración de 4 parámetros. Con esto se pretende estudiar el efecto que tiene el aumento del número de parámetros sobre el error cometido en la simulación.

En la Figuras 4.10, 4.11, 4.12, y 4.13 se muestran los resultados obtenidos para la evolución de la humedad volumétrica en las tres capas de suelo consideradas a lo largo del período simulado, así como la evolución de la lámina de agua en el perfil de suelo usando la configuración de 3 parámetros.

En la Figuras 4.14, 4.15, 4.16, y 4.17 se muestran estos mismos resultados usando la configuración de cuatro parámetros, es decir, incluyendo el valor optimizado del coeficiente *a* de Campbell de la primera capa.

Independientemente de la configuración utilizada se puede observar como, tras la calibración realizada, la lámina de agua fue bien simulada por el modelo LEACHM, especialmente durante el cultivo de la coliflor y hasta la cosecha (aproximadamente el día 180). Tras el enterrado de los restos de cosecha, después de la recogida de la coliflor, el modelo sobreestimó el contenido de agua medido en el perfil, quizás debido a las labores de enterrado de los restos del cultivo y de la preparación del cultivo siguiente (días 210 a 270), que probablemente modificaron la densidad aparente de la primera capa de suelo y que no pudo ser corregida en el modelo al no contemplar éste la posibilidad de cambio de dicha variable en el tiempo.

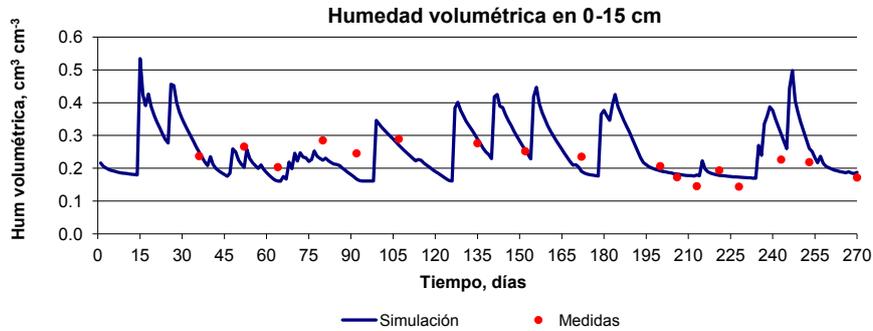


Figura 4.10: Humedad volumétrica de la capa 1 medida y simulada con LEACHM a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 3 parámetros

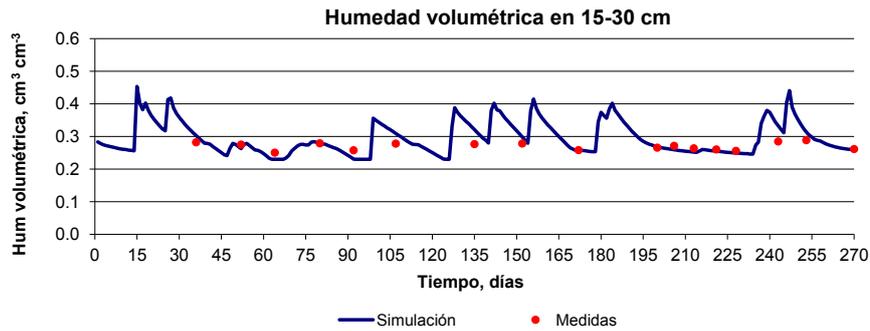


Figura 4.11: Humedad volumétrica de la capa 2 medida y simulada con LEACHM a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 3 parámetros

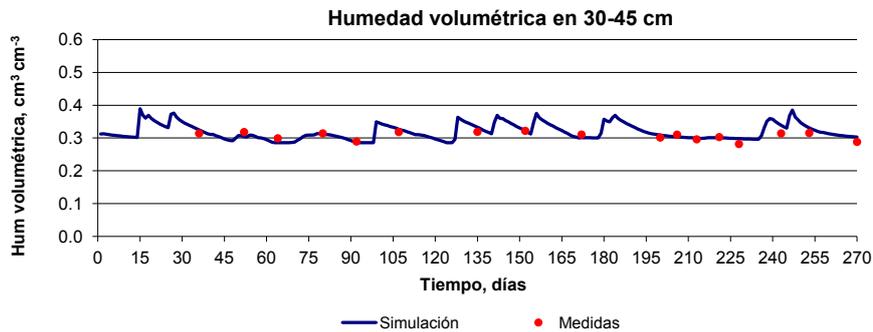


Figura 4.12: Humedad volumétrica de la capa 3 medida y simulada con LEACHM a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 3 parámetros

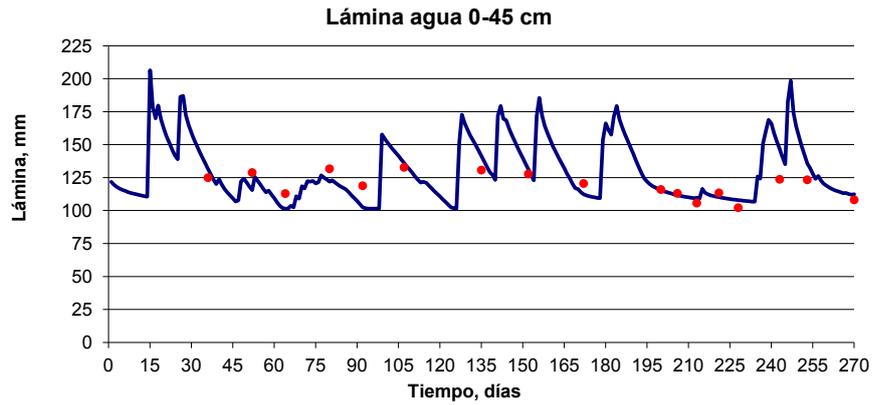


Figura 4.13: Lámina de agua en el perfil de suelo medida y simulada con LEACHM a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 3 parámetros

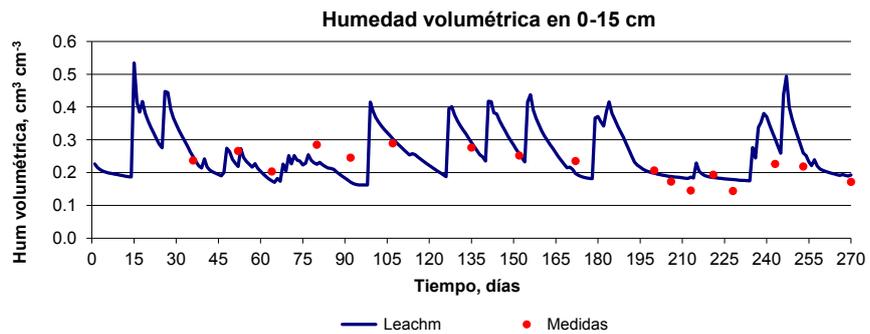


Figura 4.14: Humedad volumétrica de la capa 1 medida y simulada con LEACHM a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 4 parámetros

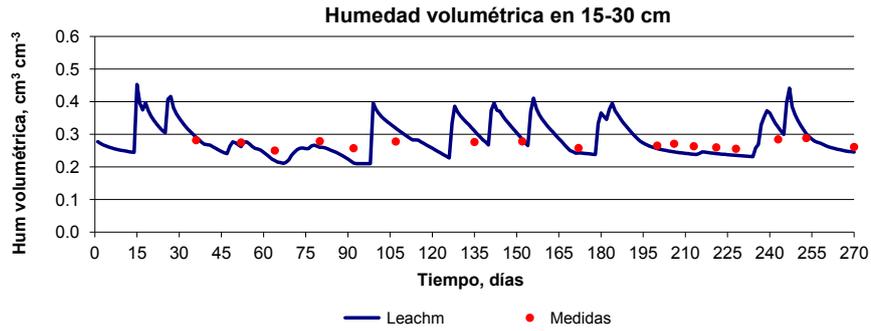


Figura 4.15: Humedad volumétrica de la capa 2 medida y simulada con LEACHM a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 4 parámetros

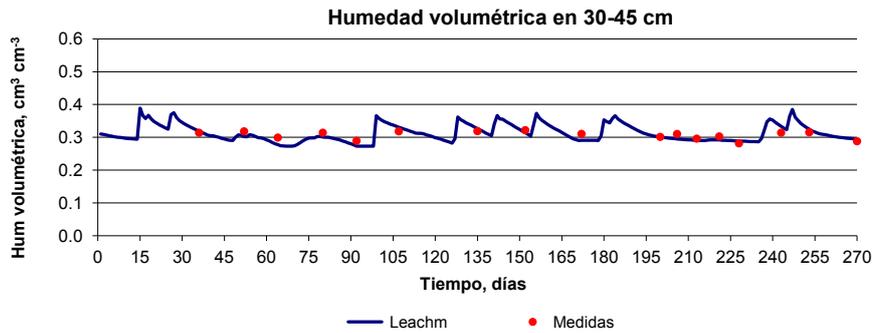


Figura 4.16: Humedad volumétrica de la capa 3 medida y simulada con LEACHM a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 4 parámetros

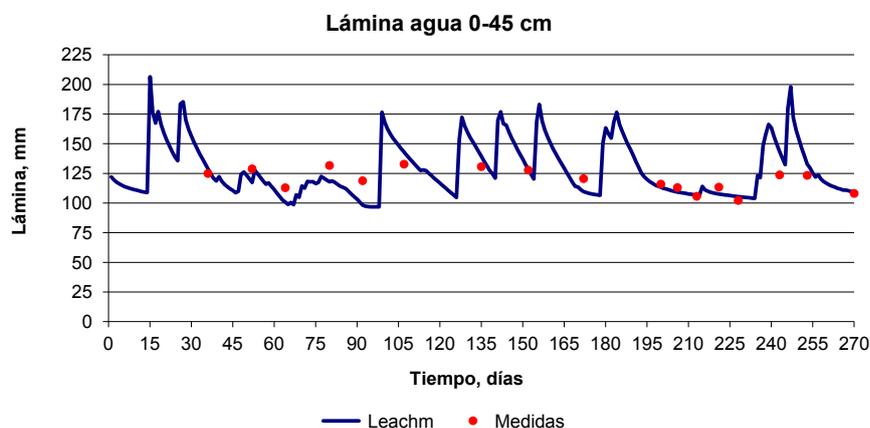


Figura 4.17: Lámina de agua en el perfil de suelo medida y simulada con LEACHM a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 4 parámetros

Los resultados obtenidos para los estadísticos utilizados en la evaluación de la calibración de los parámetros hidráulicos, considerando las medidas de humedad volumétrica en las distintas capas de suelo y la lámina en el perfil de suelo y los valores simulados en esas mismas fechas, se muestran en la Tabla 4.10 para ambas configuraciones.

En general el ajuste entre los valores de lámina en el perfil medidos y simulados es bueno, como indica el bajo valor de NRMSE en ambas configuraciones y el elevado coeficiente de concordancia; la diferencia media no llega en ninguno de los casos a los 2 mm. Respecto a la humedad volumétrica del suelo, la de la primera capa es la que mayor NRMSE tiene (0.14 - 0.19) y también la que menores coeficientes de regresión proporciona, siendo el ajuste mejor para la humedad de las capas inferiores. Este resultado podría ser explicado por la mayor oscilación en el tiempo en los valores de humedad en la primera capa de suelo, que está ligada a los procesos de entrada y salida de agua en el suelo, mientras que en profundidad los cambios de humedad son menores y la humedad es más uniforme en el tiempo. En cualquier caso, los índices de concordancia obtenidos oscilan entre 0.68 y 0.80.

Tabla 4.10: Resultados de los estadísticos obtenidos en la calibración del módulo hidráulico del modelo LEACHM

Configuración de 3 parámetros				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	lámina
dif. media	0.0058	-0.0056	-0.0039	-0.5436
RMSE	0.0411	0.0223	0.0118	9.8926
NRMSE	0.1855	0.0827	0.0384	0.0827
R	0.5848	0.8820	0.7041	0.6881
pendiente	0.5903	2.4394	0.9256	1.0235
ordenada	0.0850	-0.3824	0.0267	-2.2648
d	0.8015	0.7103	0.7958	0.7832
Configuración de 4 parámetros				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	lámina
dif. media	-0.0194	0.0055	0.0034	1.233
RMSE	0.0272	0.0250	0.0128	10.178
NRMSE	0.1430	0.0929	0.0418	0.085
R	0.6227	0.8665	0.7246	0.712
pendiente	0.6263	2.6063	1.0897	1.112
ordenada	0.0835	-0.4385	0.0309	-14.672
d	0.7761	0.6789	0.8013	0.788

Tabla 4.11: Índices de sensibilidad para los parámetros hidráulicos del moledo EU-Rotate_N obtenidos con el método LH-OAT para Paterna-1

Parámetro	niveles=10		niveles=20		niveles= 50	
	\bar{I}_i	σ	\bar{I}_i	σ	\bar{I}_i	σ
<i>FC1</i>	0.4717	0.0574	0.5060	0.0604	0.4963	0.0322
<i>SAT1</i>	0.0857	0.0292	0.0953	0.0169	0.0942	0.0118
<i>CD1</i>	0.0969	0.0184	0.0955	0.0129	0.0962	0.0046
<i>FC2</i>	0.5447	0.0977	0.6577	0.0350	0.6087	0.0489
<i>SAT2</i>	0.0856	0.0330	0.0647	0.0142	0.0774	0.0116
<i>CD2</i>	0.1106	0.0163	0.1161	0.0022	0.1022	0.0043
<i>FC3</i>	0.7308	0.0646	0.7371	0.0688	0.7460	0.0393
<i>SAT3</i>	0.1044	0.0137	0.0627	0.0162	0.0769	0.0232
<i>CD3</i>	0.1004	0.0092	0.1017	0.0132	0.0925	0.0085

Análisis de sensibilidad modelo hidráulico del EU-Rotate_N para Paterna-1

Con el modelo EU-Rotate_N se sigue un proceso similar al realizado para el modelo LEACHM, pero utilizando los parámetros descritos en la Tabla 4.5 para este modelo. En la Tabla 4.11 se muestran los valores obtenidos para la media de los índices de sensibilidad y la desviación típica obtenida en las 5 repeticiones con los diferentes niveles ensayados (10, 20 y 50).

Si se ordenan los parámetros con respecto al promedio del índice de sensibilidad, se obtienen los gráficos mostrados en las Figuras 4.18, 4.19 y 4.20, los cuales permiten identificar los parámetros más importantes.

Del mismo modo que ocurre con el modelo LEACHM, se observa que el orden de los parámetros hidráulicos más importantes se mantiene al cambiar el número de niveles utilizados. En general, la desviación típica mínima se obtiene también cuando se usan $p = 50$ niveles de los parámetros.

Se ha hecho también el análisis de sensibilidad de los parámetros hidráulicos del modelo EU-Rotate_N utilizando el método FAST. El valor de los índices de sensibilidad de primer orden, S_i , se muestran en la Tabla 4.12, y en la Figura 4.21 se presentan los valores ordenados en orden decreciente.

Los resultados del análisis de sensibilidad muestran que los parámetros hidráulicos más importantes del modelo EU-Rotate_N para la simulación de los datos de humedad del suelo en el experimento Paterna-1 son los asociados a la humedad volumétrica a capacidad de campo de cada una de las capas consideradas, seguidos de los coeficientes de drenaje de dichas capas. En las condiciones del ensayo (cultivo

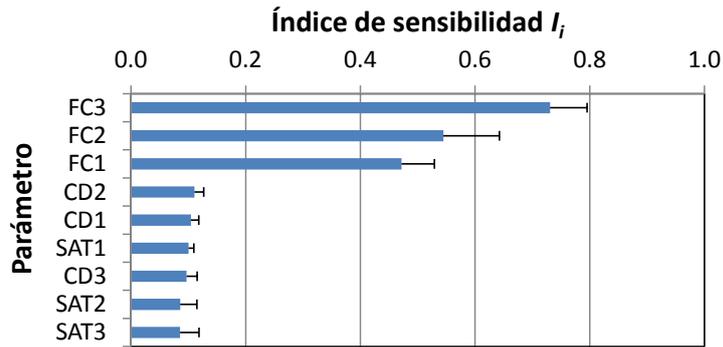


Figura 4.18: Índices de sensibilidad de los parámetros hidráulicos del modelo EU-Rotate_N usando $p = 10$ niveles en Paterna-1

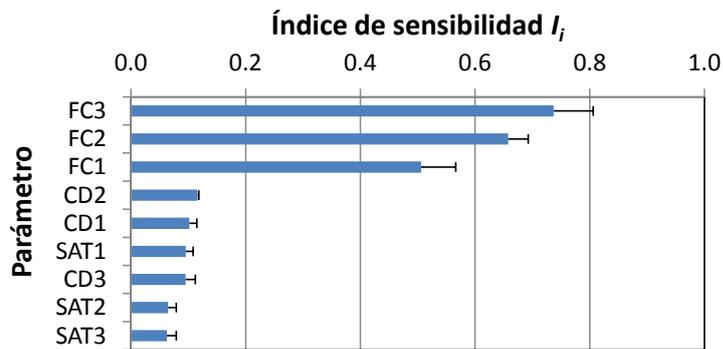


Figura 4.19: Índices de sensibilidad de los parámetros hidráulicos del modelo EU-Rotate_N usando $p = 20$ niveles en Paterna-1

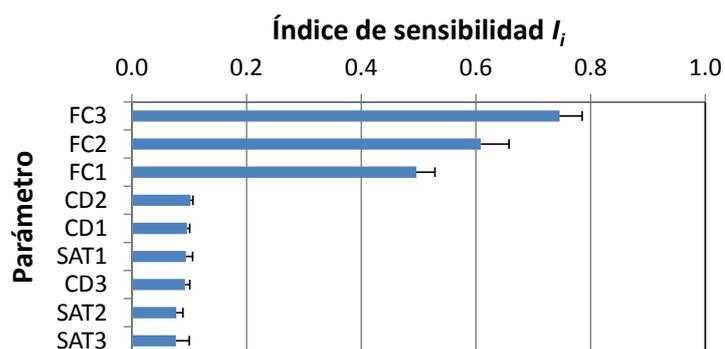


Figura 4.20: Índices de sensibilidad de los parámetros hidráulicos del modelo EU-Rotate_N usando $p = 50$ niveles en Paterna-1

Tabla 4.12: Índices de sensibilidad para los parámetros hidráulicos del moledo EU-Rotate_N obtenidos con el método FAST para Paterna-1

Parámetro	S_i
<i>FC1</i>	0.1938
<i>SAT1</i>	0.0002
<i>CD1</i>	0.0255
<i>FC2</i>	0.2725
<i>SAT2</i>	0.0037
<i>CD2</i>	0.0312
<i>FC3</i>	0.3468
<i>SAT3</i>	0.0017
<i>CD3</i>	0.0458

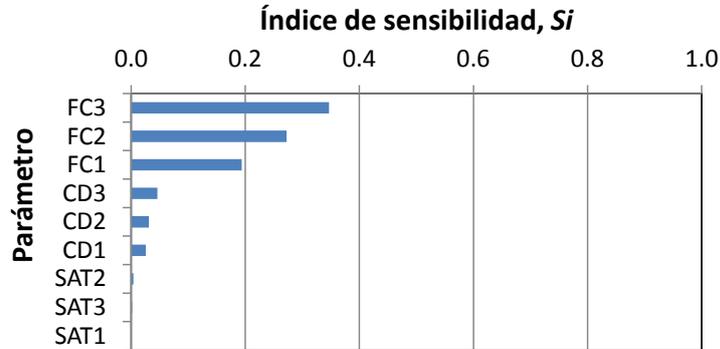


Figura 4.21: Índices de sensibilidad de priemr orden de los parámetros hidráulicos del modelo EU-Rotate_N usando el método FAST en Paterna-1

hortícola de regadío), se observa que la humedad a saturación tiene poco efecto sobre la lámina de agua en el perfil, independientemente del método y número de niveles utilizados. Al igual que se ha hecho en el caso del código LEACHM, para la calibración del modelo EU-Rotate_N consideraremos dos posibilidades: una con 3 parámetros, donde se seleccionan para el proceso de optimización los parámetros $FC1$, $FC2$ y $FC3$, y otra de 4 parámetros, donde se seleccionan los parámetros $FC1$, $FC2$, $FC3$ y $CD3$. Con ello se pretende estudiar la variación del resultado al incluir un nuevo parámetro en el proceso de optimización. El resto de parámetros hidráulicos no incluidos en la optimización se han fijado al valor medio del intervalo de variación propuesto para los mismos.

Optimización del módulo hidráulico del modelo EU-Rotate_N

Al igual que en el caso del modelo LEACHM, se utilizan los datos experimentales de humedad de suelo y la función error (4.6) que se ha utilizado para el análisis de sensibilidad. Se realiza con ello una búsqueda de los valores óptimos para los parámetros más importantes, utilizando el método de Nelder y Mead. En el proceso de optimización se restringen los posibles valores de los parámetros al intervalo de variación de los mismos establecido en la Tabla 4.5 para el caso del modelo EU-Rotate_N.

En la Tabla 4.13 se muestran, para las dos configuraciones estudiadas, los valores iniciales de los parámetros, los valores óptimos obtenidos, el valor del error y el número de iteraciones del método del Nelder y Mead realizadas en el proceso.

Se observa que tras la optimización el parámetros que más ha cambiado respecto a su valor inicial ha sido la capacidad de campo de la capa 1, que ha aumentado

Tabla 4.13: Valores iniciales y óptimos de los parámetros hidráulicos del modelo EU-Rotate_N considerando tres y cuatro parámetros en la optimización

Configuración de 3 parámetros				
Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>FC1</i>	0.250	0.362	0.316	34
<i>FC2</i>	0.270	0.263		
<i>FC3</i>	0.250	0.299		
Configuración de 4 parámetros				
Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>FC1</i>	0.250	0.361	0.2954	113
<i>FC2</i>	0.270	0.264		
<i>FC3</i>	0.250	0.308		
<i>CD3</i>	0.500	0.776		

considerablemente. Otros parámetros que han cambiado respecto a su valor inicial han sido la capacidad de campo de la capa 3, que aumenta a valores de humedad próximos a 0.30 y el coeficiente de drenaje de esta última capa, que al aumentar favorece el drenaje por debajo de la profundidad de 45 cm considerada. La configuración de cuatro parámetros proporciona menor error de optimización que la de tres parámetros, pero el número de iteraciones necesarias aumenta considerablemente.

Una vez obtenidos los valores óptimos de los parámetros más sensibles se procedió a efectuar la simulación para el período comprendido entre el 03/09/2012 y el 30/05/2013 utilizando las dos configuraciones descritas, una configuración de 3 parámetros, *FC1*, *FC2*, *FC3*, y otra configuración de 4 parámetros, *FC1*, *FC2*, *FC3*, *CD3*, que es la que proporciona el menor error.

En las Figuras 4.22, 4.23, 4.24, se muestran, para la configuración de 3 parámetros, los valores simulados de humedad volumétrica en cada una de las capas del suelo consideradas junto con los correspondientes valores de humedad medidos a lo largo del ensayo. Para la misma configuración (3p), en la Figura 4.25 se muestra la evolución de la lámina de agua en el perfil de suelo medida y simulada con EU-Rotate_N.

Estos mismos resultados, cuando se utiliza la configuración de 4 parámetros optimizados, se muestran en las Figuras 4.26, 4.27, 4.28, y 4.29, en las que se recoge la evolución en el tiempo de la humedad volumétrica simulada en cada una de las tres capas de suelo consideradas junto a los correspondientes valores medidos, así como la evolución de la lámina de agua en el perfil de suelo medida y simulada con EU-Rotate_N en Paterna-1.

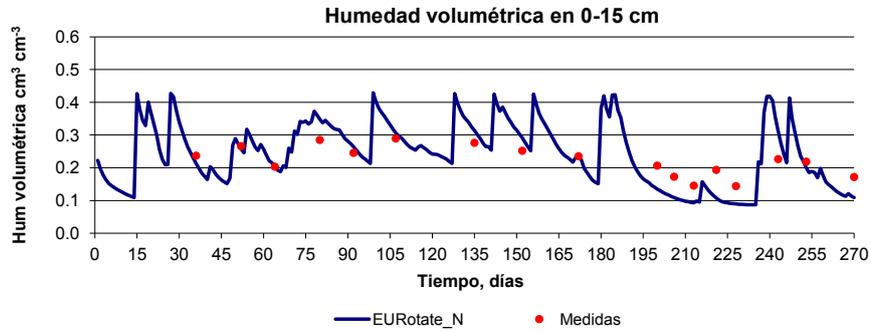


Figura 4.22: Humedad volumétrica de la capa 1 medida y simulada con EU-Rotate_N a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 3 parámetros

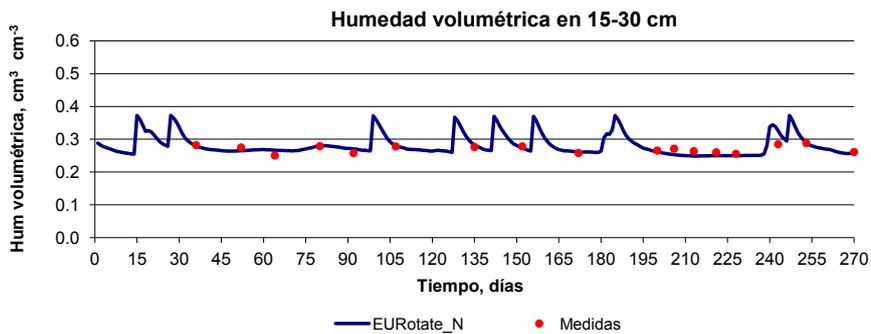


Figura 4.23: Humedad volumétrica de la capa 2 medida y simulada con EU-Rotate_N a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 3 parámetros

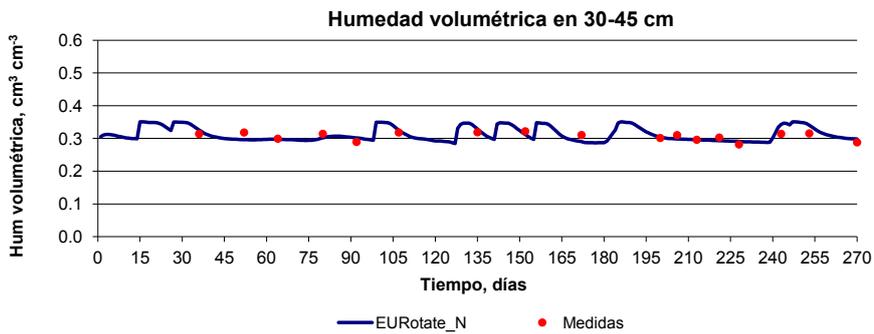


Figura 4.24: Humedad volumétrica de la capa 3 medida y simulada con EU-Rotate_N a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 3 parámetros

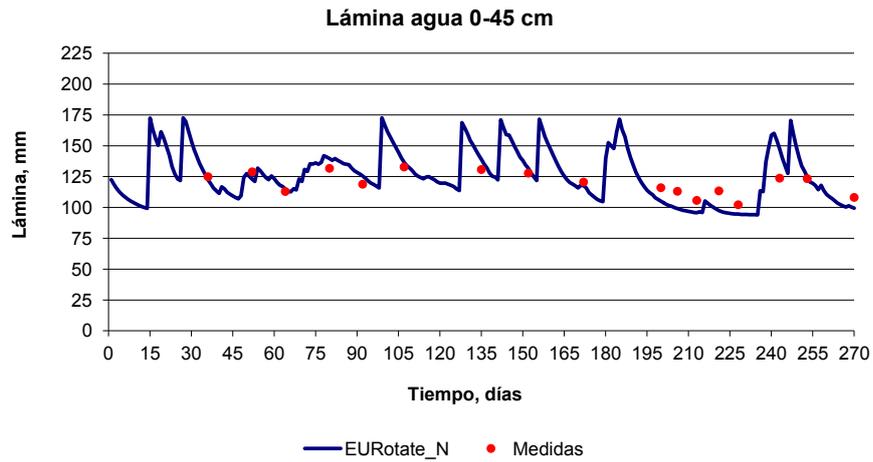


Figura 4.25: Lámina de agua en el perfil de suelo medida y simulada con EU-Rotate_N a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 3 parámetros

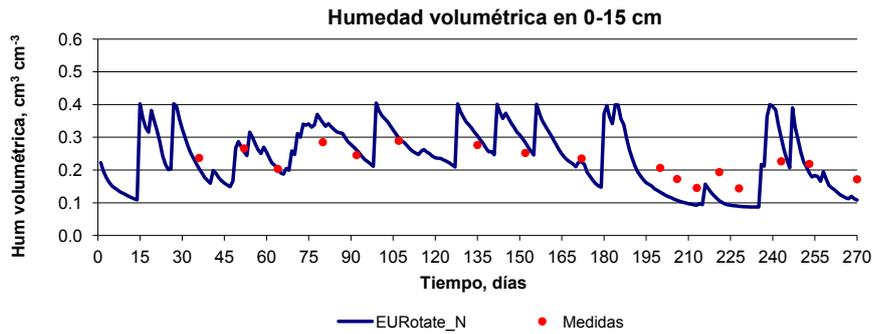


Figura 4.26: Humedad volumétrica de la capa 1 medida y simulada con EU-Rotate_N a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 4 parámetros

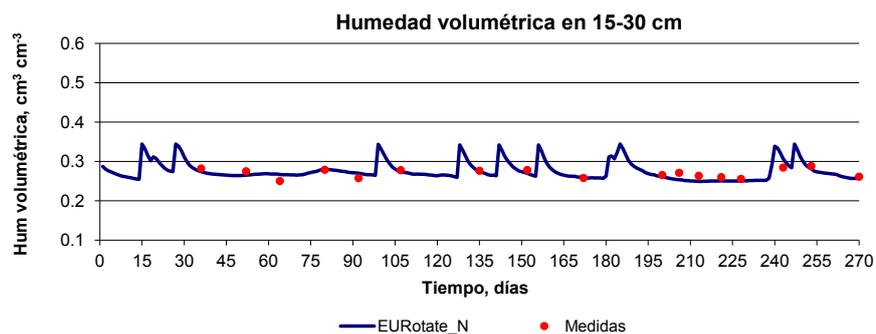


Figura 4.27: Humedad volumétrica de la capa 2 medida y simulada con EU-Rotate_N a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 4 parámetros

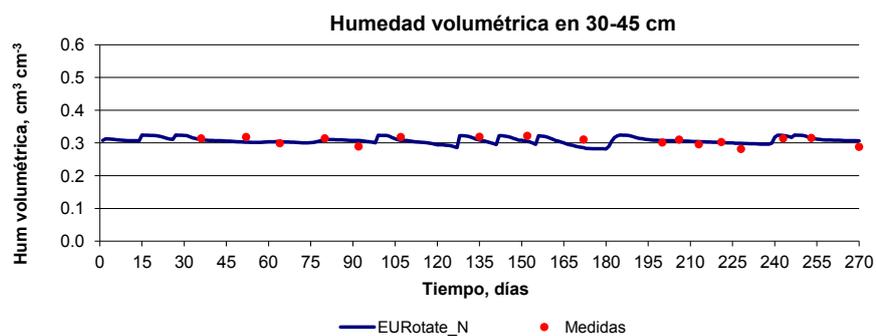


Figura 4.28: Humedad volumétrica de la capa 3 medida y simulada con EU-Rotate_N a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 4 parámetros

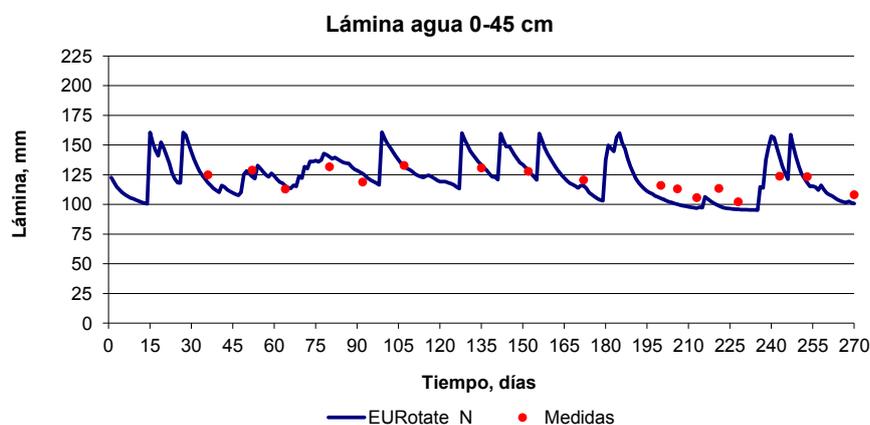


Figura 4.29: Lámina de agua en el perfil de suelo medida y simulada con EU-Rotate_N a lo largo del ensayo Paterna-1 utilizando la configuración de 4 parámetros

En la Tabla 4.14 se muestran los valores de los estadísticos utilizados para evaluar la bondad del proceso de optimización del modelo EU-Rotate_N para las dos configuraciones ensayadas.

Los estadísticos calculados muestran el buen ajuste de la humedad y la lámina de agua en el período de calibración. Como ocurría con el modelo LEACHM, los valores más altos del estadístico NRMSE obtenidos con el modelo EU-Rotate_N corresponden a la humedad volumétrica de la primera capa, caracterizada por ser la capa donde los cambios de humedad son más acentuados. La diferencia media para la lámina de agua ha sido inferior a 3 mm, mientras que los valores de NRMSE oscilan entre 7-8 % y los índices de concordancia son, en general, buenos. Si se comparan estos resultados con los del modelo LEACHM, se observa que la configuración de 4 parámetros proporciona mejores resultados en la simulación de la evolución de la humedad del suelo en esta parcela una vez calibrados los parámetros hidráulicos de ambos modelos.

4.2.2 Calibración de los parámetros relacionados con la dinámica del nitrógeno en el suelo

Tras la calibración de los parámetros hidráulicos de los modelos LEACHM y EU-Rotate_N se fijan los valores de estos parámetros en su valor óptimo en las dos configuraciones estudiadas, la configuración de 3 parámetros y la configuración de 4 parámetros. Una vez fijados los valores de estos parámetros, se sigue una metodología similar a la que se ha implementado en el caso del agua, con el objeto

Tabla 4.14: Resultados de los estadísticos obtenidos en la calibración del módulo hidráulico del modelo EU-Rotate_N

Configuración de 3 parámetros				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	lámina
dif. media	0.0363	-0.0008	-0.0017	1.2383
RMSE	0.0500	0.0135	0.0143	9.7530
NRMSE	0.2625	0.0500	0.0467	0.0815
R	0.9207	0.7039	0.5575	0.8845
pendiente	1.7928	1.1848	0.7906	1.6215
ordenada	-0.1865	-0.0490	0.0659	-75.6160
d	0.8106	0.7680	0.7117	0.8513
Configuración de 4 parámetros				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	lámina
dif. media	0.0401	0.0023	0.0006	2.7236
RMSE	0.0488	0.0107	0.0123	8.3774
NRMSE	0.2563	0.0396	0.0400	0.0700
R	0.9222	0.6827	0.2623	0.8826
pendiente	1.7437	0.8686	0.1636	1.4205
ordenada	-0.1801	0.0331	0.2559	-53.0460
d	0.8138	0.7949	0.4635	0.8727

de identificar los parámetros más importantes relacionados con la dinámica del nitrógeno en el suelo de ambos modelos y optimizar sus valores.

Análisis de sensibilidad de los parámetros del ciclo del nitrógeno de LEACHM

Se ha realizado el análisis de sensibilidad considerando los 13 parámetros y su rango de variación que se muestran en la Tabla 4.6. La referencia utilizada para obtener los índices de sensibilidad del error han sido las medidas del contenido de nitrógeno mineral (N en forma de nitrato) en el suelo en cada una de las capas consideradas para las fechas en las que se dispone de datos. Se ha considerado sólo el nitrógeno nítrico puesto que el contenido de amonio medido en el suelo fue, en general, bajo en el periodo simulado.

De forma similar al caso del agua en el suelo se considera la siguiente función de error,

$$\varepsilon = \sum_i^{ncapas} \frac{\left(\sum_j^{nmed} (N_{ij} - N_{ij}^*)^2 \right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\sum_j^{nmed} (N_{ij})^2 \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (4.7)$$

donde $ncapas$ es el número de capas de suelo consideradas, $nmed$ es el número de medidas de nitrógeno disponibles, N_{ij} es la medida j -ésima del contenido de nitrógeno nítrico en el suelo en la capa i -ésima y N_{ij}^* es el valor j -ésimo del contenido de nitrógeno nítrico en la capa i -ésima predicha por el modelo.

En el análisis de sensibilidad mediante el método LH-OAT también se han realizado, como en el caso del agua, 5 repeticiones considerando $p = 10, 20$ y 50 niveles para los parámetros seleccionados. Se han considerado sólo los resultados obtenidos con $p = 50$ niveles, ya que al considerar las 5 repeticiones del método realizadas, es donde se obtiene la desviación típica más baja para los índices de sensibilidad. Una vez ordenados en orden decreciente, los índices de sensibilidad obtenidos tras el análisis que utiliza la configuración de 3 parámetros hidráulicos optimizados se muestran en la Figura 4.30.

También se ha hecho el análisis de sensibilidad de los parámetros del ciclo del nitrógeno de LEACHM utilizando el método FAST. El valor de los índices de sensibilidad de primer orden, S_i , obtenidos para la configuración de 3 parámetros hidráulicos optimizados se muestran en la Figura 4.31.

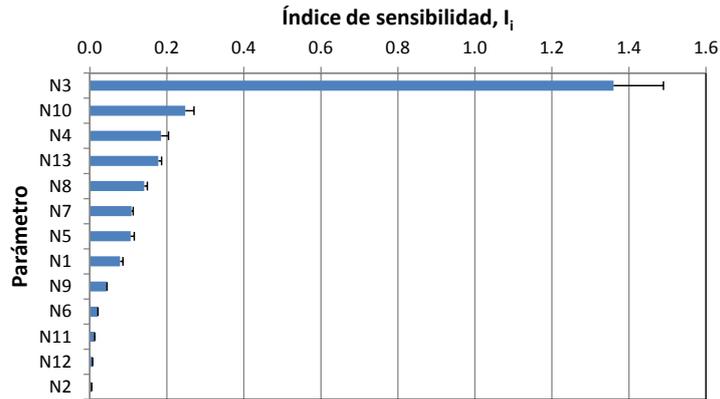


Figura 4.30: Índices de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno en el modelo LEACHM obtenidos usando el método LH-OAT y la configuración de 3 parámetros hidráulicos optimizados

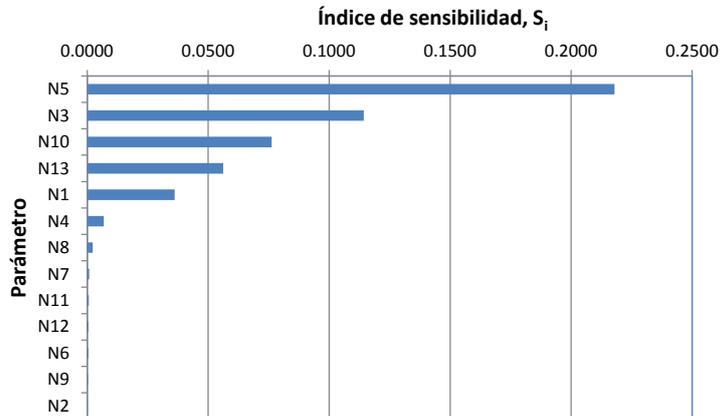


Figura 4.31: Índices de sensibilidad de primer orden de los parámetros del nitrógeno en el modelo LEACHM obtenidos usando el método FAST y la configuración de 3 parámetros hidráulicos optimizados

De la misma manera se procede utilizando la configuración de 4 parámetros hidráulicos optimizados. Los resultados de estos mismos análisis de sensibilidad LH-OAT y FAST se presentan en las Figuras 4.32 y 4.33, respectivamente.

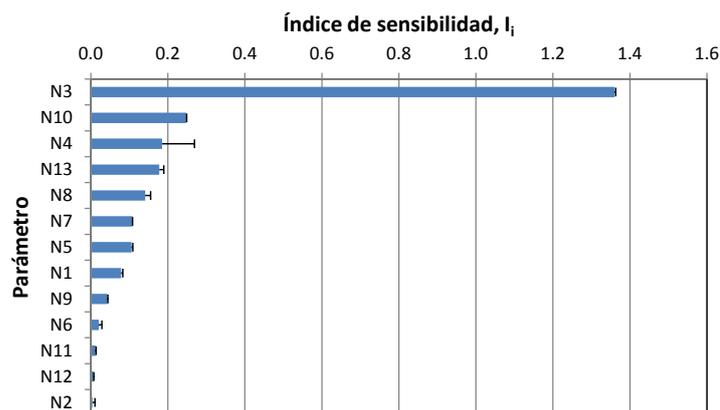


Figura 4.32: Índices de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno en el modelo LEACHM obtenidos usando el método LH-OAT y la configuración de 4 parámetros hidráulicos optimizados

Los resultados muestran que para un mismo método de sensibilidad, la inclusión de un nuevo parámetro hidráulico ajustado no modifica la importancia de los parámetros relacionados con el ciclo del nitrógeno en LEACHM. Sin embargo, la importancia atribuida a cada parámetro del N es diferente dependiendo del método utilizado en el análisis de sensibilidad, cosa que no ocurría con los parámetros hidráulicos. Así, mientras que el método LH-OAT proporciona el siguiente orden de importancia para los principales parámetros del nitrógeno: *N3*, *N10*, *N4*, *N13*, *N8* y *N7*, el método FAST proporciona este otro orden: *N5*, *N3*, *N10*, *N13*, *N1* y *N4*.

Según el método LH-OAT, el parámetro más importante con diferencia respecto a los demás es el factor de eficiencia de síntesis, relacionado con la cantidad de C que va a los compartimentos de humus y biomasa microbiana respecto al C total transformado, es decir incluyendo el CO₂ producido. Al estar el ciclo de N en LEACHM acoplado al de C, este factor es que el regula la cantidad de nitrógeno transformado en el suelo. Le sigue en importancia la tasa de mineralización de los residuos en la capa 1 y la fracción de humificación. Según el método FAST, la tasa de nitrificación es el parámetro de mayor influencia sobre el contenido de nitrógeno mineral en el suelo. Sin embargo este parámetro solo aparecía en la séptima posición según el método LH-OAT. Los siguientes parámetros en importancia según FAST si que coincidían en importancia con el otro método (*N3* y *N10*). El método

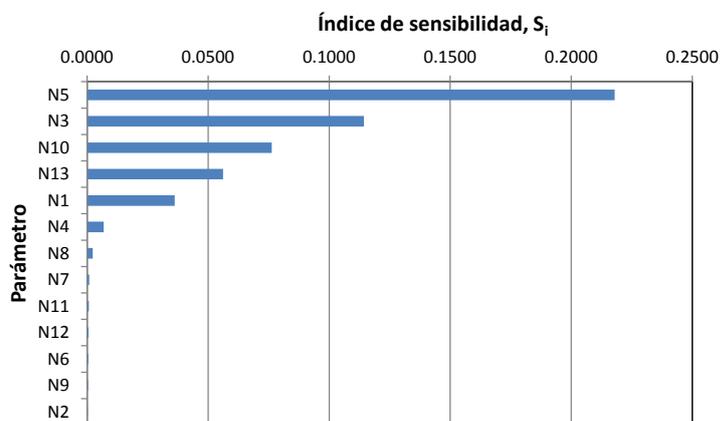


Figura 4.33: Índices de sensibilidad de primer orden de los parámetros del nitrógeno en el modelo LEACHM obtenidos usando el método FAST y la configuración de 4 parámetros hidráulicos optimizados

FAST atribuye un valor considerable a los cinco primeros parámetros, pero muy bajo a los demás.

Optimización del módulo del nitrógeno de LEACHM

Utilizando los datos experimentales del contenido de nitrato en el suelo a lo largo del ensayo y la función error (4.7) que se ha utilizado para el análisis de sensibilidad, se realiza una búsqueda de los valores óptimos de los parámetros más importantes, establecidos mediante el análisis de sensibilidad, utilizando el método de Nelder y Mead, restringiendo los posibles valores al intervalo de variación establecido en la Tabla 4.6.

Para comparar los resultados que han proporcionado los dos métodos de análisis de sensibilidad utilizados, se han realizado distintas optimizaciones introduciendo los distintos parámetros en orden decreciente de importancia según el criterio dado por el método LH-OAT y el método FAST. Se pretende con ello comprobar en que medida, la inclusión de nuevos parámetros optimizados mejoran el error de simulación.

En las Tablas 4.15, 4.16, 4.17 y 4.18 se muestran los resultados de las distintas optimizaciones realizadas, para las dos configuraciones que utilizan los parámetros del agua ya calibrados, introduciendo los distintos parámetros del nitrógeno siguiendo los criterios dados por los métodos LH-OAT y FAST. En estas Tablas se muestran también, los valores iniciales de los parámetros, los valores óptimos obtenidos, el

Tabla 4.15: Valores iniciales y óptimos de los parámetros del nitrógeno del modelo LEACHM usando la configuración de 3 parámetros del agua y el orden establecido al utilizar el método LH-OAT

Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>N</i> 3	0.6000	0.6640	1.645	89
<i>N</i> 10	0.0825	0.0904		
<i>N</i> 4	0.3500	0.4130		
<i>N</i> 13	0.0050	0.0010		
<i>N</i> 3	0.6000	0.6654	1.6581	97
<i>N</i> 10	0.0825	0.1004		
<i>N</i> 4	0.3500	0.3667		
<i>N</i> 13	0.0050	0.0010		
<i>N</i> 8	9.25E-05	1.04E-04		
<i>N</i> 3	0.6000	0.7120	1.555	147
<i>N</i> 10	0.0825	0.1119		
<i>N</i> 4	0.3500	0.2748		
<i>N</i> 13	0.0050	0.0017		
<i>N</i> 8	9.25E-05	1.13E-04		
<i>N</i> 7	9.25E-05	2.62E-07		
<i>N</i> 3	0.6000	0.5544		
<i>N</i> 10	0.0825	0.0961		
<i>N</i> 4	0.3500	0.2532		
<i>N</i> 13	0.0050	0.0044		
<i>N</i> 8	9.25E-05	1.28E-04		
<i>N</i> 7	9.25E-05	1.07E-04		
<i>N</i> 5	7.50E-01	2.54E-02		

valor del error y el número de iteraciones necesarias para la optimización con el método del Nelder y Mead.

A la vista de los resultados de las distintas optimizaciones, la configuración que proporciona un error menor, es la configuración de 4 parámetros del agua y 7 parámetros del nitrógeno siguiendo el criterio proporcionado por el método LH-OAT. En este caso, se observa que a medida que aumenta el número de parámetros considerados en la optimización disminuye el error en el ajuste obtenido y aumenta el número de iteraciones, especialmente con el método LH-OAT. Los cambios en los valores optimizados no son muy grandes, siendo la tasa de nitrificación el parámetro que mayor variación tiene respecto del valor inicial considerado.

Utilizando la mejor configuración obtenida como resultado de la calibración del módulo del nitrógeno, en las Figuras 4.34, 4.35 y 4.36, se presenta la evolución

Tabla 4.16: Valores iniciales y óptimos de los parámetros del nitrógeno del modelo LEACHM usando la configuración de 3 parámetros del agua y el orden establecido al utilizar el método FAST

Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>N5</i>	0.7500	0.0519	1.00263	90
<i>N3</i>	0.6000	0.5995		
<i>N10</i>	0.0825	0.1261		
<i>N13</i>	0.0050	0.0010		
<i>N5</i>	0.7500	0.0183	0.94225	163
<i>N3</i>	0.6000	0.4458		
<i>N10</i>	0.0825	0.1785		
<i>N13</i>	0.0050	0.0018		
<i>N1</i>	4.6000	6.1059		
<i>N5</i>	0.7500	0.0383	1.00185	155
<i>N3</i>	0.6000	0.6694		
<i>N10</i>	0.0825	0.1617		
<i>N13</i>	0.0050	0.0047		
<i>N1</i>	4.6000	4.1240		
<i>N4</i>	0.3500	0.1461		

en el tiempo del contenido de nitrato simulado mediante el código LEACHM y medido en cada una de las capas de suelo, y en la Figura 4.37 la evolución del contenido de nitrato en el conjunto del perfil de suelo junto a los valores medidos.

En la Tabla 4.19 se muestran los valores de los estadísticos obtenidos con el ajuste correspondiente a la mejor configuración resultante de la calibración de los parámetros del módulo de nitrógeno en el modelo LEACHM.

Se observa que para el conjunto del perfil el modelo tiende a infraestimar el contenido de nitrógeno mineral, tras el enterrado de residuos del cultivo a pesar de haber incluido en la calibración un parámetro relacionado con la mineralización de los restos de cosecha. Ello se traduce en una diferencia media aproximada de 2 kg N/ha y un RMSE de 16 kg N/ha. El elevado valor de R, la pendiente de la recta de regresión, próxima a 1, y el valor bajo de la ordenada en el origen corroboran el buen ajuste conseguido, con un índice de acuerdo de 0.95. Por capas, el mejor ajuste se obtiene en la capa intermedia (15-30 cm), mientras que la capa 1 es la que mayor valor de RMSE tiene. Esta capa es la que registra mayores cambios en el contenido de nitrógeno mineral a lo largo de la simulación, y es la que concentra la incorporación de los restos de cosecha, época en la que peores resultados se obtienen. Este resultado estaría indicando que la calibración de la

Tabla 4.17: Valores iniciales y óptimos de los parámetros del nitrógeno del modelo LEACHM usando la configuración de 4 parámetros del agua y el orden establecido al utilizar el método LH-OAT

Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>N</i> 3	0.6000	0.6854	1.7329	43
<i>N</i> 10	0.0825	0.0783		
<i>N</i> 4	0.3500	0.3540		
<i>N</i> 13	0.0050	0.0048		
<i>N</i> 3	0.6000	0.6956	1.7143	82
<i>N</i> 10	0.0825	0.1093		
<i>N</i> 4	0.3500	0.3574		
<i>N</i> 13	0.0050	0.0022		
<i>N</i> 8	9.25E-05	1.02E-04		
<i>N</i> 3	0.6000	0.6715	1.6167	146
<i>N</i> 10	0.0825	0.1185		
<i>N</i> 4	0.3500	0.4847		
<i>N</i> 13	0.0050	0.0022		
<i>N</i> 8	9.25E-05	7.91E-05		
<i>N</i> 7	9.25E-05	1.20E-07		
<i>N</i> 3	0.6000	0.5867	0.9355	292
<i>N</i> 10	0.0825	0.1218		
<i>N</i> 4	0.3500	0.2610		
<i>N</i> 13	0.0050	0.0010		
<i>N</i> 8	9.25E-05	1.04E-04		
<i>N</i> 7	9.25E-05	7.59E-05		
<i>N</i> 5	0.7500	0.0338		

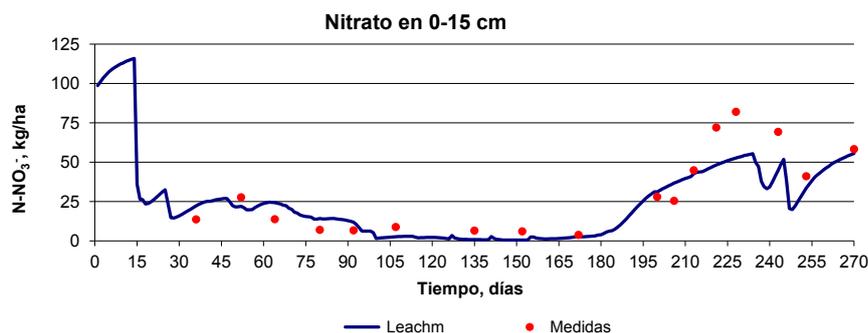


Figura 4.34: Contenido de nitrato en la capa 1 medido y simulado con LEACHM usando la mejor configuración obtenida en el proceso de optimización para el ensayo de Paterna-1

Tabla 4.18: Valores iniciales y óptimos de los parámetros del nitrógeno del modelo LEACHM usando la configuración de 4 parámetros del agua y el orden establecido al utilizar el método FAST

Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
N5	0.7500	0.0536	1.069	114
N3	0.6000	0.6719		
N10	0.0825	0.1497		
N13	0.0050	0.0019		
N5	0.7500	0.6854	1.7184	84
N3	0.6000	0.6942		
N10	0.0825	0.0832		
N13	0.0050	0.0044		
N1	4.6000	4.5972		
N5	0.7500	0.0614	1.0742	160
N3	0.6000	0.6613		
N10	0.0825	0.1533		
N13	0.0050	0.0036		
N1	4.6000	1.9980		
N4	0.3500	0.3633		
N5	0.7500	0.0958	1.1606	151
N3	0.6000	0.6145		
N10	0.0825	0.0950		
N13	0.0050	0.0040		
N1	4.6000	0.8815		
N4	0.3500	0.5077		
N8	9.25E-05	1.41E-04		

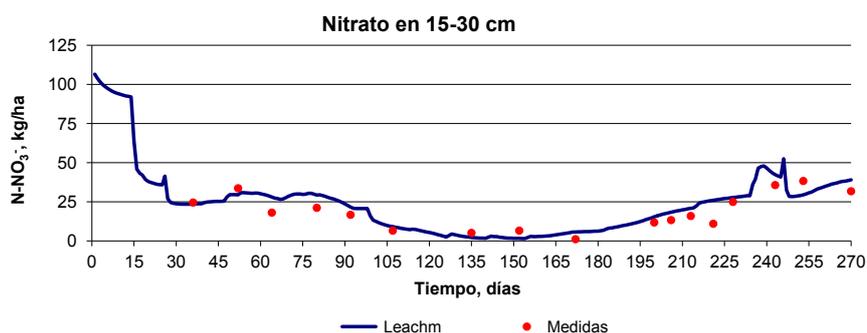


Figura 4.35: Contenido de nitrato en la capa 2 medido y simulado con LEACHM usando la mejor configuración obtenida en el proceso de optimización para el ensayo de Paterna-1

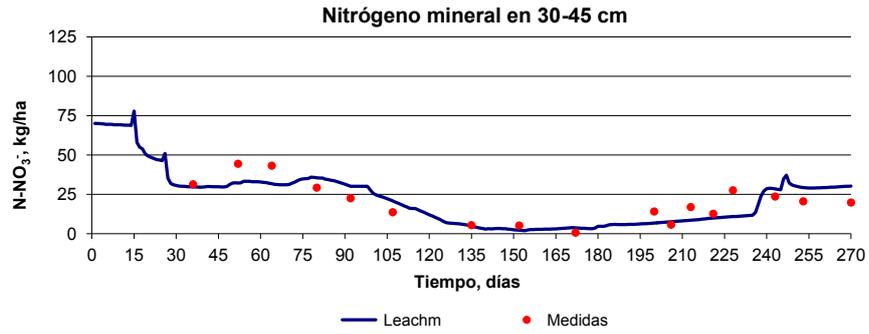


Figura 4.36: Contenido de nitrato en la capa 3 medido y simulado con LEACHM usando la mejor configuración obtenida en el proceso de optimización para el ensayo de Paterna-1

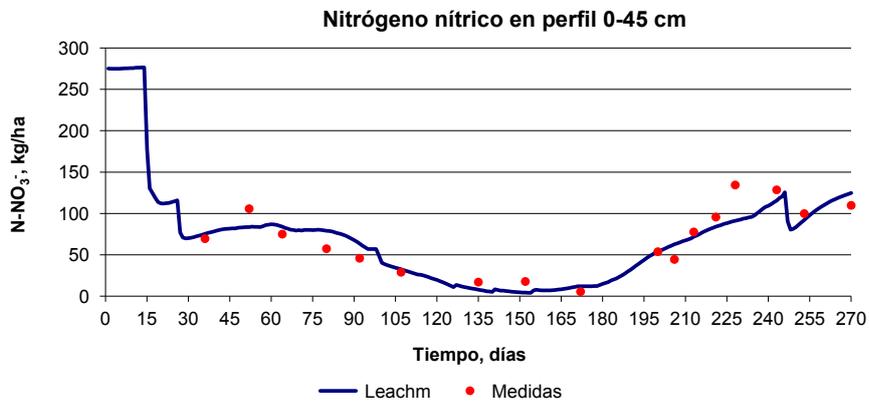


Figura 4.37: Contenido de nitrato en el perfil de suelo medido y simulado con LEACHM usando la mejor configuración obtenida en el proceso de optimización para el ensayo de Paterna-1

Tabla 4.19: Valores de los estadísticos para la mejor configuración obtenida en el proceso de calibración del módulo de nitrógeno del modelo LEACHM

Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	8.52	-3.15	0.82	1.70
RMSE	11.45	6.59	7.94	16.29
NRMSE	0.24	0.35	0.40	0.24
R	0.91	0.87	0.79	0.91
pendiente	0.65	0.90	0.77	0.81
ordenada	6.57	4.95	3.82	11.51
d	0.88	0.91	0.88	0.95

descomposición no ha sido lo suficientemente buena, y que algún otro parámetro podría estar interaccionando con la tasa de mineralización de los residuos.

Análisis de sensibilidad de los parámetros del ciclo del nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N

De igual forma a como se ha hecho para el modelo LEACHM, se ha realizado el análisis de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno de EU-Rotate_N considerando los trece parámetros seleccionados y su rango de variación que se muestran en la Tabla 4.6. La referencia utilizada para obtener los índices de sensibilidad del error han sido las medidas de contenido de nitrato en el suelo en cada una de las capas consideradas para las fechas en las que se dispone de datos y la función error empleada es la función (4.7), que ya se ha definido para el modelo LEACHM.

En el análisis de sensibilidad mediante el método LH-OAT también se han realizado 5 repeticiones considerando $p = 10, 20$ y 50 niveles, aunque sólo se muestran los resultados correspondientes a $p = 50$ niveles, por ser los que menor desviación típica proporcionan para el conjunto de las 5 repeticiones. Los índices de sensibilidad obtenidos con este método, utilizando en el análisis la configuración de 3 parámetros hidráulicos optimizada, se muestran en la Figura 4.38, una vez ordenados los parámetros en orden decreciente.

Se ha hecho también el análisis de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno utilizando el método FAST. Los resultados obtenidos, utilizando la configuración de 3 parámetros del agua optimizados, se muestran en la Figura 4.39, y los resultados de estos mismos análisis de sensibilidad para la configuración de 4 parámetros hidráulicos optimizados se presentan en las Figuras 4.40 y 4.41.

Los resultados muestran que, al igual que ocurría con el modelo LEACHM, los dos análisis de sensibilidad atribuyen una importancia diferente a los distintos pa-

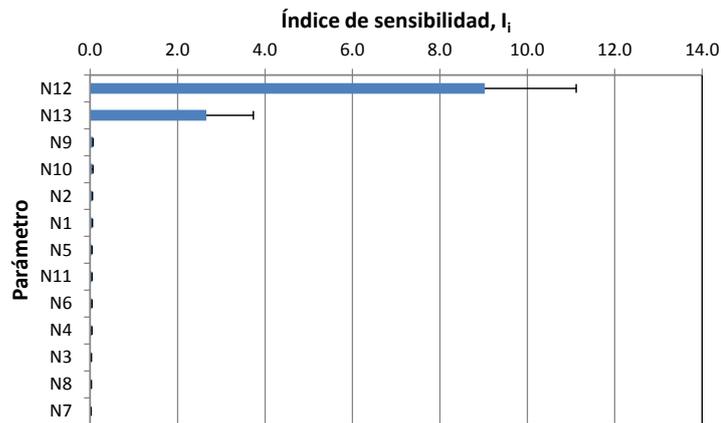


Figura 4.38: Índices de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N obtenidos usando el método LH-OAT y la configuración de 3 parámetros hidráulicos optimizados

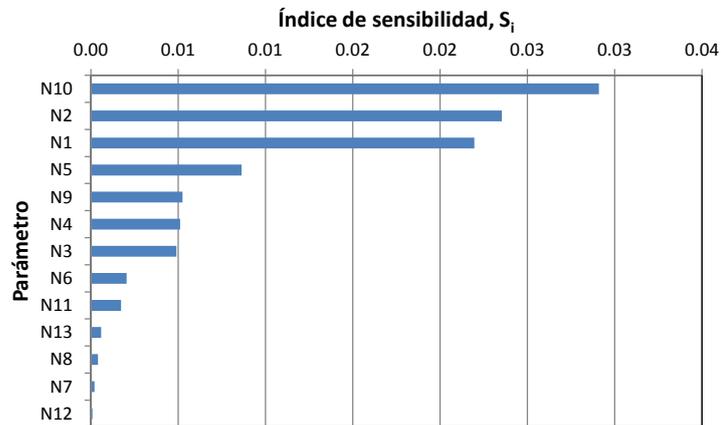


Figura 4.39: Índices de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N obtenidos usando el método FAST y la configuración de 3 parámetros hidráulicos optimizados

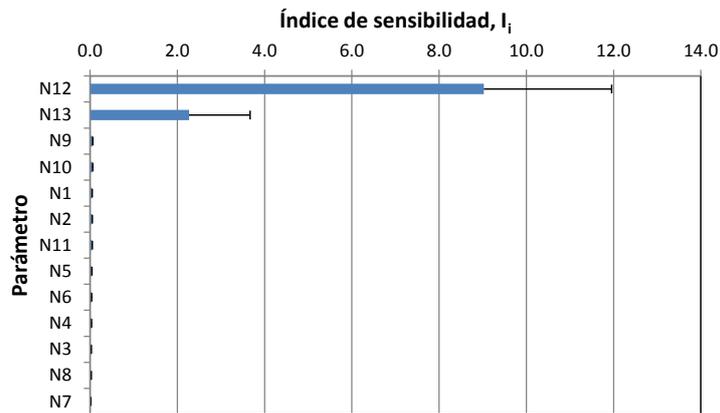


Figura 4.40: Índices de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N obtenidos usando el método LH-OAT y la configuración de 4 parámetros hidráulicos optimizados

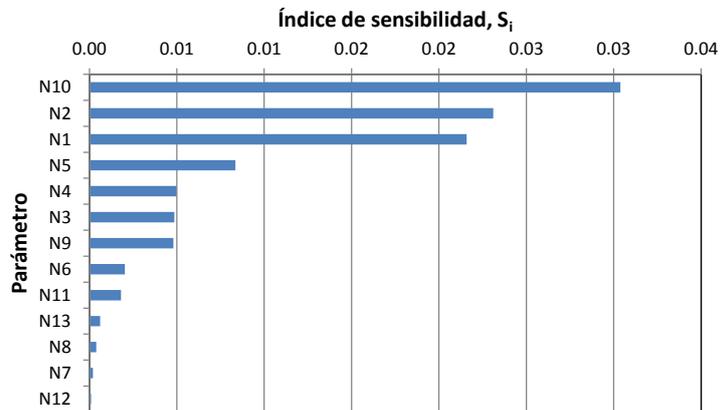


Figura 4.41: Índices de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N obtenidos usando el método FAST y la configuración de 4 parámetros hidráulicos optimizados

rámetros del módulo del nitrógeno de EU-Rotate_N, independientemente de la configuración asociada a los parámetros hidráulicos ajustados que se utilice. Así para la configuración de tres parámetros optimizados del agua el método LH-OAT proporciona el siguiente orden de importancia para los parámetros del nitrógeno: N_{12} , N_{13} , N_9 , N_{10} , N_2 , N_1 , mientras que el método FAST proporciona el siguiente orden: N_{10} , N_2 , N_1 , N_5 , N_9 y N_4 . Los parámetros más importantes, con diferencia, según el criterio LH-OAT son los relacionados con la cantidad y calidad de los restos de cosecha de coliflor, y en menor medida el factor de eficiencia de la fracción lábil de la materia orgánica del suelo y la tasa de nitrificación. Sin embargo el criterio FAST discrimina más parámetros relevantes, lo que indicaría una mayor capacidad de este método para seleccionar parámetros en situaciones donde las interacciones entre parámetros pueden ser importantes, como es el caso del ciclo del N. Con el criterio FAST los parámetros importantes son la tasa de nitrificación y las tasas de descomposición de la fracción lábil y no lábil de la materia orgánica del suelo. Sin embargo no señala como relevantes los relacionados con los restos de cosecha, algo sorprendente ya que estos eran los más importantes según el otro criterio estudiado. Estos resultados inciden en la complejidad de este tipo de análisis cuando los parámetros están interaccionando y afectan a varios compartimentos relacionados entre si.

Para la configuración de 4 parámetros del agua el orden obtenido con el método LH-OAT ha sido: N_{12} , N_{13} , N_9 , N_{10} , N_1 , N_2 , mientras que el método FAST proporciona el siguiente orden: N_{10} , N_2 , N_1 , N_5 , N_4 y N_3 . Se observa que la introducción de un nuevo parámetro hidráulico optimizado no provoca cambios en los parámetros más relevantes establecidos por ambos métodos.

Optimización del módulo de nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N

Utilizando de nuevo los datos experimentales de contenido de nitrato en el suelo y la función error (4.7), que se ha utilizado para el análisis de sensibilidad, se realiza una búsqueda de los valores óptimos de los parámetros más importantes utilizando el método de Nelder y Mead, restringiendo los posibles valores al intervalo de variación establecido en la Tabla 4.6.

Al igual que se ha hecho para el modelo LEACHM, para comparar los resultados que han proporcionado los dos métodos de análisis de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno, se han realizado distintas optimizaciones introduciendo los distintos parámetros en orden decreciente de importancia según el criterio dado por el método LH-OAT y el método FAST. En las Tablas 4.20, 4.21, 4.22 y 4.23 se muestran los resultados obtenidos para las distintas optimizaciones realizadas, en las que se han utilizado las dos configuraciones con los parámetros del agua ajustados (3 y 4 parámetros) y en las que se han ido introduciendo los distintos parámetros del nitrógeno en orden de importancia de acuerdo a los criterios dados

Tabla 4.20: Valores iniciales y óptimos de los parámetros del nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N usando la configuración de 3 parámetros del agua y el criterio dado por LH-OAT

Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
N12	0.6500	0.6500	1.3076	19
N13	0.4250	0.4250		
N9	5.00E-01	5.25E-01		
N10	1.00E-01	1.00E-01		
N12	0.6500	0.6500	1.3076	22
N13	0.4250	0.4250		
N9	5.00E-01	2.52E-01		
N10	1.00E-01	1.00E-01		
N2	1.40E-04	1.40E-04		
N12	0.6500	0.6502	1.3063	53
N13	0.4250	0.4219		
N9	5.00E-01	5.28E-01		
N10	1.00E-01	0.0999		
N2	1.40E-04	1.41E-04		
N1	4.35E-05	4.35E-05		
N12	0.6500	0.4846	1.3073	42
N13	0.4250	0.7663		
N9	5.00E-01	2.66E-04		
N10	1.00E-01	0.6961		
N2	1.40E-04	1.14E-04		
N1	4.35E-05	0.0049		
N5	1.30E-03	1.00E-03		

por los métodos LH-OAT y FAST. Se muestra así mismo el error en el proceso de optimización y el número de iteraciones necesarias en cada caso.

En este caso, se observa que el error obtenido en el ajuste no varía al aumentar el número de parámetros a optimizar, tanto para los parámetros seleccionados con el método LH-OAT como para los seleccionados con el método FAST. Así mismo, se observa como algunos de los parámetros señalados como relevantes por el análisis de sensibilidad, apenas cambian su valor inicial en el proceso de optimización. Este comportamiento de los parámetros relacionados con el ciclo del nitrógeno en el suelo, ponen de manifiesto la conveniencia de separar, en la medida de lo posible, los diferentes procesos en los que se ve envuelto el nitrógeno del suelo a la hora de realizar la optimización de parámetros de un modelo complejo, como es el caso de LEACHM y EU-Rotate_N.

Tabla 4.21: Valores iniciales y óptimos de los parámetros del nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N usando la configuración de 3 parámetros del agua y el orden establecido al utilizar el método FAST

Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>N10</i>	1.00E-01	6.78E-02	1.2759	44
<i>N2</i>	1.40E+00	1.58E-04		
<i>N1</i>	4.35E-05	4.40E-05		
<i>N5</i>	0.0010	0.0011		
<i>N10</i>	1.00E-01	1.00E-02	1.3073	40
<i>N2</i>	1.40E+00	1.40E-04		
<i>N1</i>	4.35E-05	4.35E-05		
<i>N5</i>	0.0010	0.0010		
<i>N9</i>	0.5000	0.5258		
<i>N10</i>	1.00E-01	9.67E-02	1.2987	49
<i>N2</i>	1.40E+00	1.40E-04		
<i>N1</i>	4.35E-05	4.29E-05		
<i>N5</i>	0.0010	0.0010		
<i>N9</i>	0.5000	0.5195		
<i>N4</i>	0.0100	0.0105		
<i>N10</i>	1.00E-01	5.715E-02	1.2526	88
<i>N2</i>	1.40E-04	1.073E-04		
<i>N1</i>	4.35E-05	4.180E-05		
<i>N5</i>	0.0010	0.0009		
<i>N9</i>	0.5000	0.4749		
<i>N4</i>	0.0100	0.0154		
<i>N3</i>	0.0010	0.0012		

Tabla 4.22: Valores iniciales y óptimos de los parámetros del nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N usando la configuración de 4 parámetros del agua y el orden establecido al utilizar el método LH-OAT

Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
N12	0.6500	6.50E-01	1.3502	11
N13	0.4250	4.46E-01		
N9	5.00E-01	5.00E-01		
N10	1.00E-01	1.00E-01		
N12	0.6500	0.6500	1.3500	11
N13	0.4250	0.4456		
N9	5.00E-01	5.00E-01		
N10	1.00E-01	1.00E-01		
N1	4.35E-01	4.36E-05		
N12	0.6500	0.6504	1.2895	64
N13	0.4250	0.4784		
N9	5.00E-01	5.51E-01		
N10	1.00E-01	9.12E-02		
N1	4.35E-01	3.79E-05		
N2	1.40E-04	1.44E-04		
N12	0.6500	0.6499	1.3479	35
N13	0.4250	0.4463		
N9	5.00E-01	5.04E-01		
N10	1.00E-01	9.93E-02		
N1	4.35E-01	4.37E-05		
N2	1.40E-04	1.39E-04		
N11	5.00E-02	5.00E-02		

Tabla 4.23: Valores iniciales y óptimos de los parámetros del nitrógeno en el modelo EU-Rotate_N usando la configuración de 4 parámetros del agua y el orden establecido al utilizar el método FAST

Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>N10</i>	1.00E-01	4.56E-02	1.2157	45
<i>N2</i>	1.40E+00	1.70E-04		
<i>N1</i>	4.35E-05	4.40E-05		
<i>N5</i>	0.0010	0.0010		
<i>N10</i>	1.00E-01	4.503E-02	1.2149	55
<i>N2</i>	1.40E+00	1.614E-04		
<i>N1</i>	4.35E-05	4.368E-05		
<i>N5</i>	0.0010	0.0010		
<i>N4</i>	0.0100	0.0104		
<i>N10</i>	1.00E-01	5.11E-02	1.2340	63
<i>N2</i>	1.40E+00	1.66E-04		
<i>N1</i>	4.35E-05	4.27E-05		
<i>N5</i>	0.0010	0.0012		
<i>N4</i>	0.0100	0.0159		
<i>N3</i>	0.0010	0.0006		
<i>N10</i>	1.00E-01	4.77E-02	1.2428	91
<i>N2</i>	1.40E+00	1.24E-04		
<i>N1</i>	4.35E-05	5.05E-05		
<i>N5</i>	0.0010	0.0009		
<i>N4</i>	0.0100	0.1560		
<i>N3</i>	0.0010	0.5012		
<i>N9</i>	0.5000	0.5076		

No obstante, la configuración que proporciona un error menor, es la configuración de 4 parámetros del agua y 5 parámetros del nitrógeno siguiendo el criterio proporcionado por el método FAST. Utilizando este resultado para la calibración, en las Figuras 4.42, 4.43 y 4.44, se presenta la evolución en el tiempo del contenido de nitrato simulado mediante el código EU-Rotate_N en cada una de las capas de suelo. En la Figura 4.45 se muestra la evolución del contenido de nitrato en todo el perfil de suelo. En todas ellas se representan también los valores medidos de nitrógeno nítrico en el ensayo de Paterna-1.

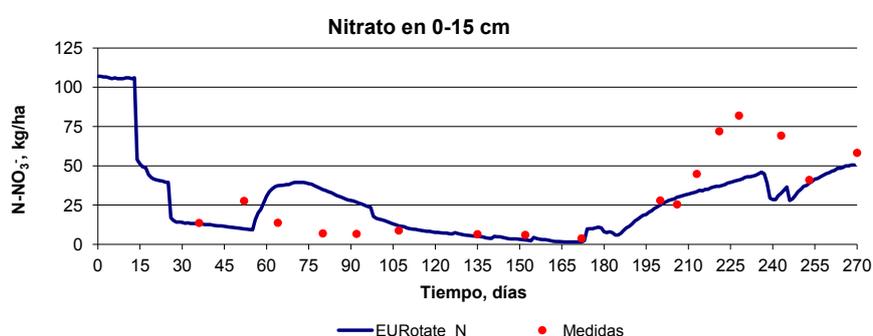


Figura 4.42: Contenido de nitrato en la capa 1 medido y simulado con EU-Rotate_N usando la mejor configuración obtenida en el proceso de optimización para el ensayo de Paterna-1

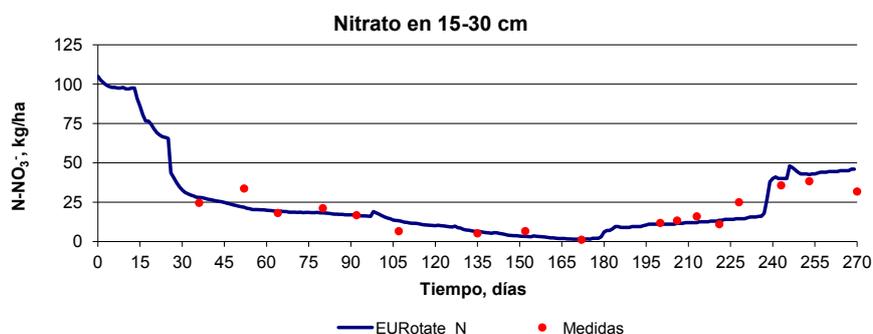


Figura 4.43: Contenido de nitrato en la capa 2 medido y simulado con EU-Rotate_N usando la mejor configuración obtenida en el proceso de optimización para el ensayo de Paterna-1

Por otra parte, en la Tabla 4.24 se muestran los valores obtenidos para los distintos estadísticos cuando se emplea en la simulación la mejor configuración de todas las realizadas en el proceso de optimización de los parámetros del ciclo del nitrógeno con el modelo EU-Rotate_N.

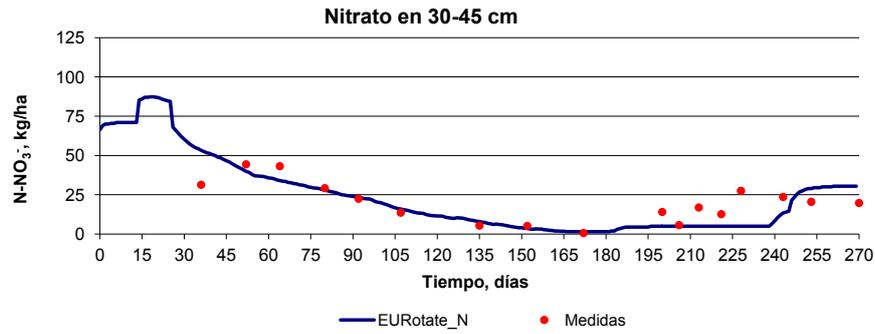


Figura 4.44: Contenido de nitrato en la capa 3 medido y simulado con EU-Rotate_N usando la mejor configuración obtenida en el proceso de optimización para el ensayo de Paterna-1

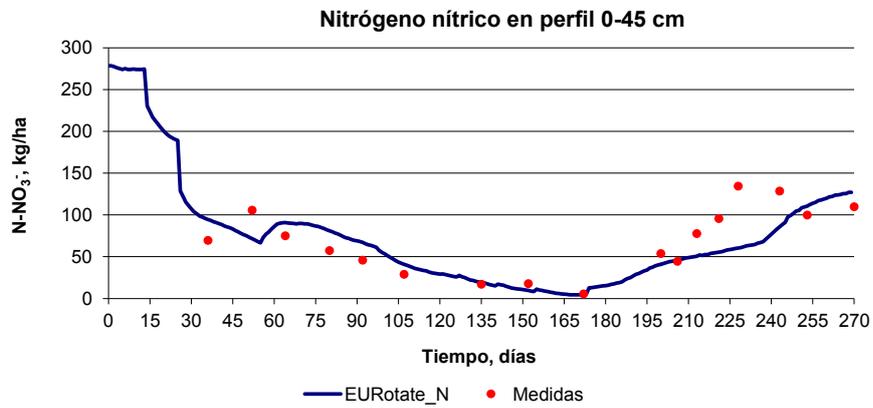


Figura 4.45: Contenido de nitrato en el perfil de suelo medido y simulado con EU-Rotate_N usando la mejor configuración obtenida en el proceso de optimización para el ensayo de Paterna-1

Tabla 4.24: Valores de los estadísticos para la mejor configuración obtenida en el proceso de calibración del módulo de nitrógeno del modelo EU-Rotate_N

Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	15.61	-0.21	1.66	6.5
RMSE	19.97	5.92	10.12	28.6
NRMSE	0.42	0.32	0.51	0.4
R	0.66	0.89	0.76	0.7
pendiente	0.37	1.03	0.95	0.6
ordenada	13.96	-0.43	-0.58	20.5
d	0.66	0.94	0.86	0.8

Se observa que el modelo EU-Rotate_N también tiende a infraestimar el contenido de nitrato en el perfil del suelo tras el enterrado de los restos de cosecha, lo que proporciona una diferencia media en este caso de 6.5 kg N/ha y un RMSE de 29 kg N/ha. Sin embargo, durante el cultivo el ajuste es bueno, con una ligera tendencia a sobreestimar el contenido de nitrato en el perfil de suelo. El coeficiente R obtenido ha sido de 0.7, que es un poco inferior al obtenido con el modelo LEACHM. En cualquier caso el índice de acuerdo, d, es de 0.8, que se puede considerar como un buen índice de acuerdo para el ajuste realizado. Por capas, el ajuste es bueno en las capas de 15-30 y 30-45, especialmente durante la época de cultivo. En la capa superficial el modelo sobreestima claramente el contenido de nitrato tras el abonado (aproximadamente el día 60) e infraestima dicho contenido en las etapas finales de la simulación (a partir del día 210). Ello se traduce en una diferencia media de casi 16 kg N/ha, un RMSE de 20 kg N/ha y un índice de concordancia bajo, de 0.66.

4.3 Calibración de los modelos de transporte de agua y nitrógeno en Paterna-2

Para calibrar los modelos LEACHM y EU-Rotate_N utilizando los datos experimentales medidos en la parcela Paterna-2, se siguen esencialmente los mismos pasos que se han seguido en el estudio realizado para la parcela Paterna-1, cuyos resultados se muestran en la sección anterior. En este caso se muestran conjuntamente los resultados de los dos modelos evaluados.

4.3.1 Calibración de los parámetros hidráulicos de los modelos

En primer lugar, se realiza el análisis de sensibilidad de los parámetros hidráulicos de los modelos LEACHM y EU-Rotate_N utilizando los métodos LH-OAT y FAST. En la Figura 4.46 se muestran los índices de sensibilidad ordenados de mayor a menor obtenidos mediante el método LH-OAT para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N utilizando $p = 50$ niveles de los parámetros, y en la Figura 4.47 se muestran los índices de sensibilidad de primer orden obtenidos mediante el método FAST en ambos modelos.

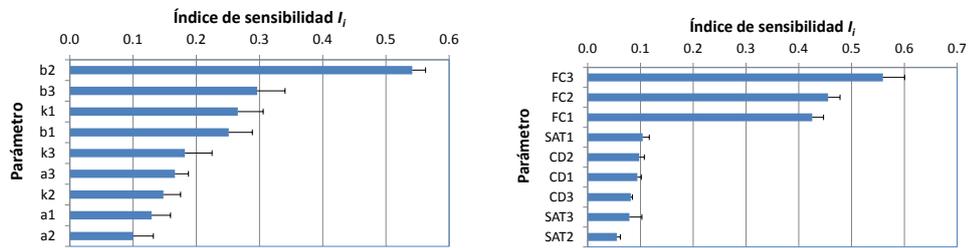


Figura 4.46: Índices de sensibilidad obtenidos con el método LH-OAT para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N en Paterna-2 con $p = 50$ niveles

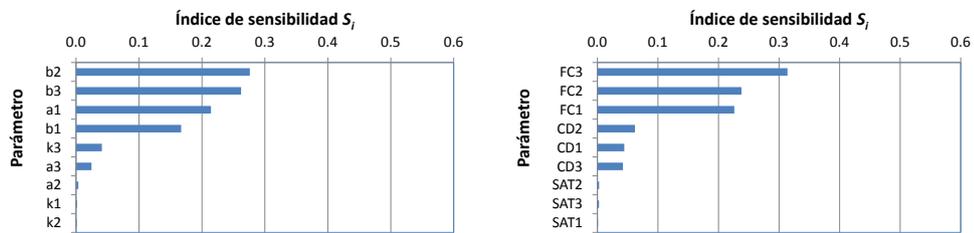


Figura 4.47: Índices de sensibilidad obtenidos con el método FAST para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N en Paterna-2

Para las condiciones del ensayo de Paterna-2, el método LH-OAT establece un orden diferente de los parámetros del modelo LEACHM, respecto de los establecidos para Paterna-1. Si bien el exponente b de la ecuación de Campbell sigue siendo el parámetro que más influencia tiene, las diferencias ya no son tan acusadas y este método señala a la conductividad hidráulica saturada de la primera capa como un parámetro con cierta relevancia. Sin embargo el método FAST establece para este mismo modelo otro orden diferente, incluyendo junto al parámetro b de cada capa, el parámetro equivalente al potencial de entrada de aire en el suelo de la

capa 3 (parámetro a_3). Este método establece unas marcadas diferencias entre parámetros.

Respecto al modelo EU-Rotate_N, no hay diferencias en los parámetros más importantes con respecto a los establecidos para Paterna-1, y siguen siendo la humedad a capacidad de campo de cada capa los parámetros que más influencia tienen en el comportamiento del agua en el suelo. Le siguen en importancia los coeficientes de drenaje de las distintas capas, aunque el método LH-OAT señala también a la humedad de saturación de la capa 1 como un factor a considerar.

Tras el proceso de optimización donde se van introduciendo los parámetros en el orden de importancia que dan los análisis de sensibilidad, se han considerado las siguientes configuraciones: una configuración de 3 parámetros para el LEACHM, donde se han optimizado los parámetros: b_1 , b_2 y b_3 , y una configuración de 3 parámetros para el EU-Rotate_N donde se han optimizado los parámetros: FC_1 , FC_2 y FC_3 . Además se ha utilizado una configuración de 4 parámetros para el LEACHM, donde se han optimizado los parámetros b_1 , b_2 , b_3 y a_1 , y una configuración de 4 parámetros para el EU-Rotate_N donde se han optimizado los parámetros FC_1 , FC_2 , FC_3 y SAT_1 . Estas configuraciones son las que han producido el menor error. En la Tabla 4.25 se muestran los valores iniciales y óptimos de los parámetros, el error obtenido en el proceso de optimización utilizando el método de Nelder y Mead, y el número de iteraciones necesarias para completar dicha optimización.

En las Figuras 4.48, 4.49, 4.50, y 4.51 se compara la evolución de la humedad del suelo en las 3 capas consideradas y la lámina en el conjunto del perfil del suelo simuladas con los modelos LEACHM y EU-Rotate_N utilizando las configuraciones de 3 parámetros seleccionadas. En la Tabla 4.26 se recogen los valores de los estadísticos obtenidos para estos ajustes.

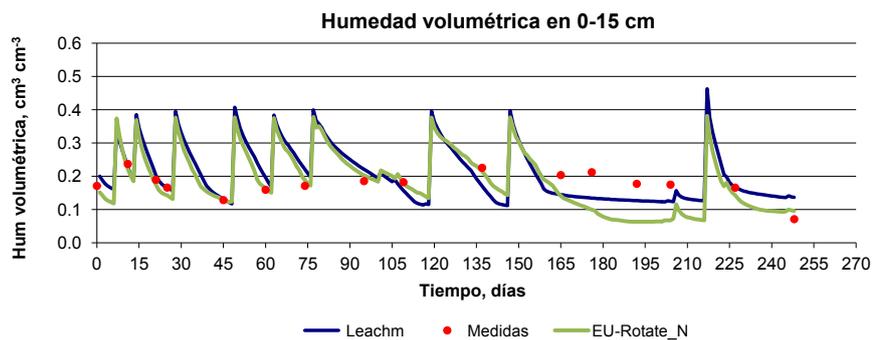


Figura 4.48: Evolución de la humedad volumétrica en la capa 1 con la configuración de 3 parámetros en Paterna-2

Tabla 4.25: Valores iniciales y óptimos de los parámetros hidráulicos de los modelos LEACHM y EU-Rotate_N para las configuraciones de 3 y 4 parámetros en Paterna-2

Configuración de 3 parámetros LEACHM				
Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>b1</i>	5.07	3.47	0.376	47
<i>b2</i>	10.07	12.18		
<i>b3</i>	12.57	14.01		
Configuración de 3 parámetros EU-Rotate_N				
Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>FC3</i>	0.225	0.300	0.450	42
<i>FC2</i>	0.225	0.295		
<i>FC1</i>	0.250	0.314		
Configuración de 4 parámetros LEACHM				
Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>b1</i>	5.07	3.54	0.385	42
<i>b2</i>	10.07	11.26		
<i>b3</i>	12.57	14.11		
<i>a1</i>	-5.075	-5.110		
Configuración de 4 parámetros EU-Rotate_N				
Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
<i>FC3</i>	0.225	0.299	0.438	52
<i>FC2</i>	0.225	0.286		
<i>FC1</i>	0.250	0.349		
<i>SAT1</i>	0.475	0.451		

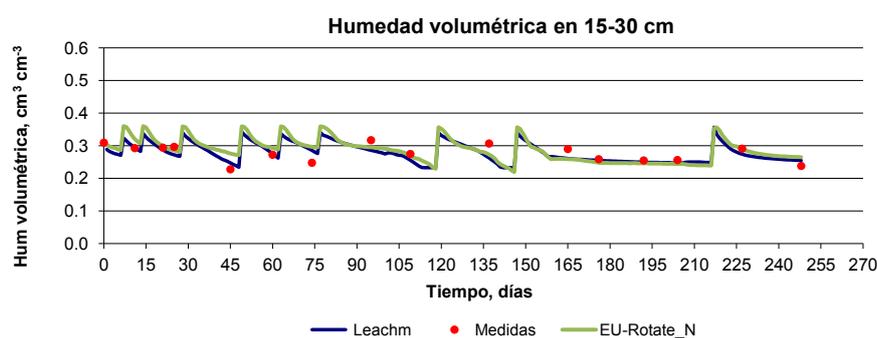


Figura 4.49: Evolución de la humedad volumétrica en la capa 2 con la configuración de 3 parámetros en Paterna-2

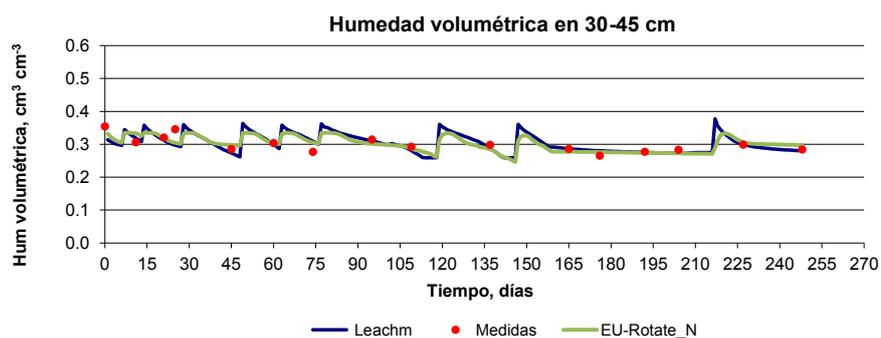


Figura 4.50: Evolución de la humedad volumétrica en la capa 2 con la configuración de 3 parámetros en Paterna-2

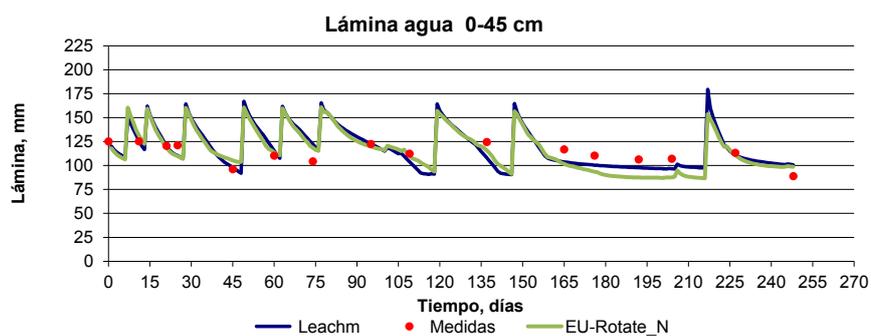


Figura 4.51: Evolución de la lámina de agua en el perfil de suelo utilizando la configuración de 3 parámetros en Paterna-2

Tabla 4.26: Valores de los estadísticos obtenidos en la calibración de los parámetros hidráulicos de LEACHM y EU-Rotate_N utilizando las configuraciones de 3 parámetros en Paterna-2

Modelo LEACHM				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	lámina
dif. media	0.0322	0.0072	0.0036	2.795
RMSE	0.0382	0.0220	0.0171	9.676
NRMSE	0.2169	0.0801	0.0578	0.086
R	0.3496	0.5799	0.5603	0.566
pendiente	0.3225	0.3503	0.4253	0.548
ordenada	0.1116	0.1712	0.1663	47.802
d	0.4463	0.7063	0.7132	0.746
Modelo EU-Rotate_N				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	lámina
dif. media	0.0280	-0.0030	-0.0001	3.738
RMSE	0.0542	0.0254	0.0171	8.350
NRMSE	0.3073	0.0927	0.0577	0.075
R	0.4591	0.4350	0.5697	0.557
pendiente	0.5822	0.3682	0.4881	0.668
ordenada	0.0456	0.1764	0.1516	33.458
d	0.6053	0.6543	0.7366	0.710

De forma similar se procede con la configuración de 4 parámetros. Así, en las figuras 4.52, 4.53, 4.54, y 4.55 se compara la evolución de la humedad del suelo en las 3 capas de suelo y la lámina en el perfil del suelo medida y simuladas con los modelos LEACHM y EU-Rotate_N con las configuraciones de 4 parámetros. Así mismo, en la Tabla 4.27 se recogen los valores de los estadísticos obtenidos para estos ajustes.

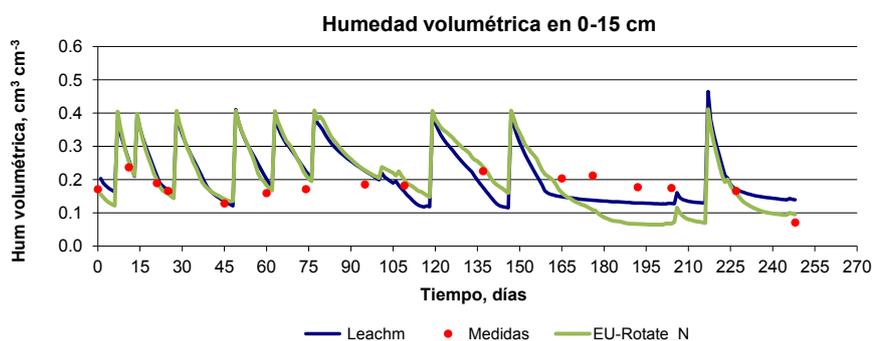


Figura 4.52: Evolución de la humedad volumétrica en la capa 1 con la configuración de 4 parámetros en Paterna-2

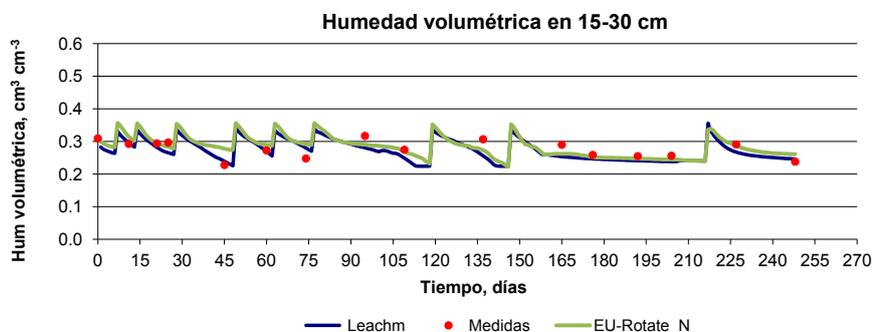


Figura 4.53: Simulación de la evolución de la humedad volumétrica en la capa 2 con la configuración de 4 parámetros en Paterna-2

Se observa que, al igual que ocurría en la parcela Paterna-1, tanto el modelo LEACHM como el modelo EU-Rotate_N proporcionan para la parcela Paterna-2 un buen ajuste de la dinámica del agua durante el periodo del cultivo. Tras el enterrado de los residuos ambos modelos tienden a infrestimar el contenido de agua en el perfil de suelo, especialmente en la capa 1 (0-15 cm). Esto puede ser debido a la labor de enterrado de los residuos que realiza el agricultor ya que se produce un cambio en la densidad aparente del suelo en esta capa. En cuanto a los estadísticos

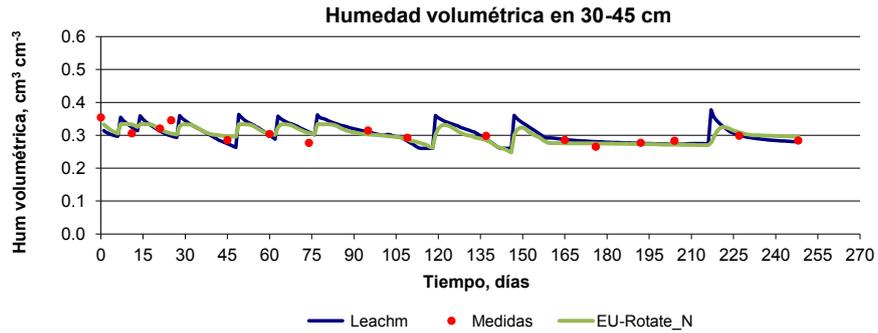


Figura 4.54: Evolución de la humedad volumétrica en la capa 2 con la configuración de 4 parámetros en Paterna-2

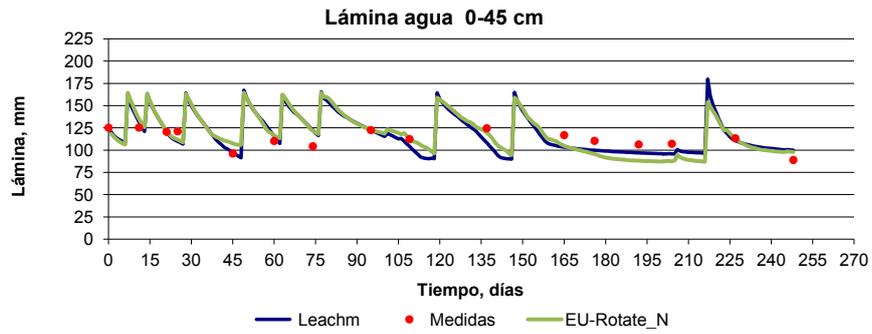


Figura 4.55: Evolución de la lámina de agua en el perfil de suelo utilizando la configuración de 4 parámetros en Paterna-2

Tabla 4.27: Valores de los estadísticos obtenidos en la calibración de los parámetros hidráulicos de LEACHM y EU-Rotate_N utilizando las configuraciones de 4 parámetros en Paterna-2

Modelo LEACHM				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	lámina
dif. media	0.0284	0.0138	0.0026	2.675
RMSE	0.0366	0.0251	0.0173	9.986
NRMSE	0.2075	0.0914	0.0585	0.089
R	0.3952	0.5791	0.5468	0.579
pendiente	0.4082	0.3947	0.4337	0.621
ordenada	0.1029	0.1524	0.1649	39.767
d	0.4487	0.6898	0.7127	0.754
Modelo EU-Rotate_N				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	lámina
dif. media	0.0116	-0.0015	-0.0001	1.505
RMSE	0.0531	0.0243	0.0169	8.117
NRMSE	0.3011	0.0885	0.0573	0.072
R	0.4843	0.4375	0.5856	0.581
pendiente	0.7272	0.3254	0.5182	0.760
ordenada	0.0365	0.1866	0.1426	25.415
d	0.6480	0.6484	0.7503	0.745

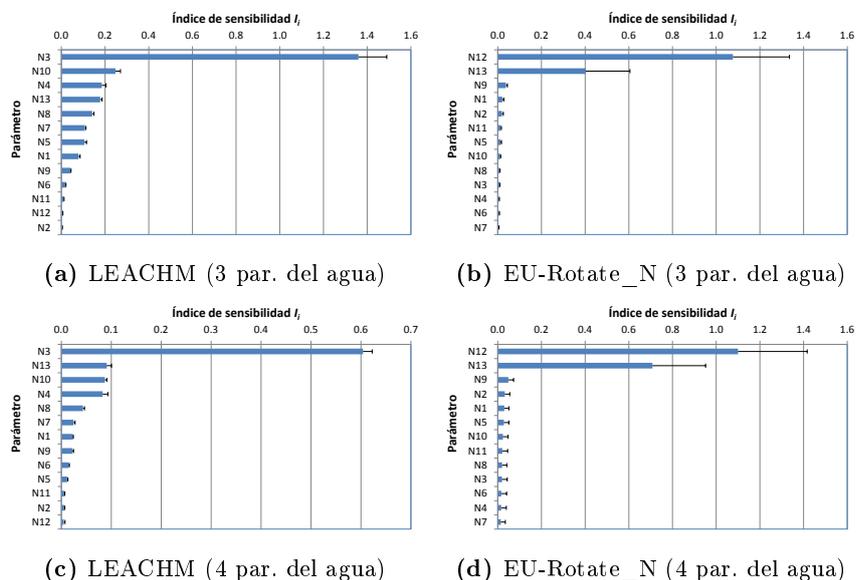


Figura 4.56: Índices de sensibilidad para los parámetros del nitrógeno obtenidos con el método LH-OAT para ambos modelos en Paterna-2

obtenidos, en ambos modelos se obtienen resultados similares, consiguiéndose un índice de acuerdo para el perfil de suelo superior a 0.7.

4.3.2 Calibración de los parámetros relacionados con la dinámica del nitrógeno

Una vez se han calibrado los valores de los parámetros del agua para los dos modelos, se realiza un análisis de sensibilidad de los parámetros del nitrógeno utilizando los métodos LH-OAT y FAST. En la Figura 4.56 se muestra el orden de los parámetros proporcionado por el método LH-OAT para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N y en la Figura 4.57 se muestra el orden de los parámetros proporcionado por el método FAST para ambos modelos, tanto para la configuración donde se han ajustado 3 parámetros del agua como para la configuración donde se han ajustado 4 parámetros del agua.

Tras el proceso de optimización donde se han ido introduciendo los parámetros en el orden de importancia que dan los análisis de sensibilidad, se han seleccionado las siguientes configuraciones por ser aquellas en las que se ha obtenido el menor error. Para el modelo LEACHM se han optimizado los parámetros: N5, N3, N10, N13, N1 y N4, con la configuración donde se optimizan 4 parámetros del agua y siguiendo el orden dado por el método FAST. Para el modelo EU-Rotate_N se

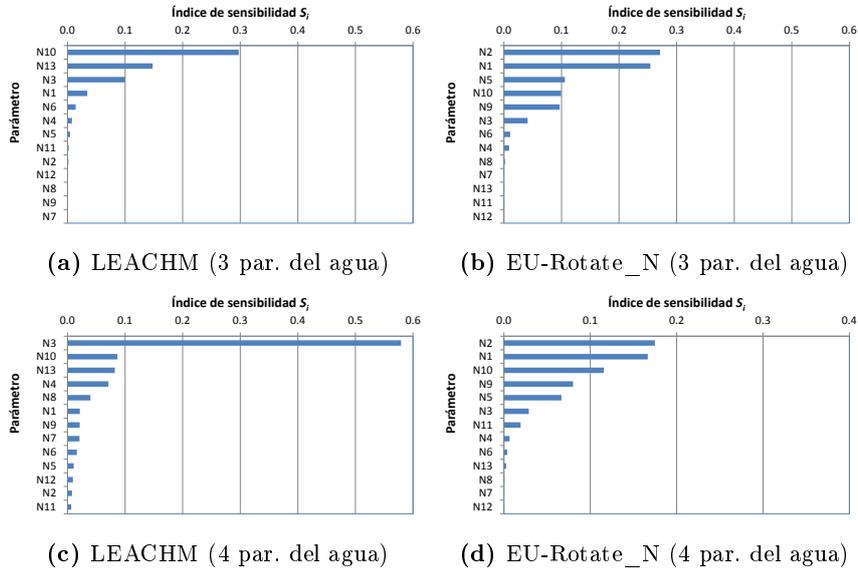


Figura 4.57: Índices de sensibilidad para los parámetros del nitrógeno obtenidos con el método FAST para ambos modelos en Paterna-2

han optimizado los parámetros $N2$, $N1$, $N5$, $N10$, $N9$, $N3$ y $N6$, siguiendo el criterio dado por el método FAST para la configuración donde se han optimizado 3 parámetros del agua.

En la Tabla 4.28 se muestran los valores iniciales y óptimos de los parámetros seleccionados, el error obtenido en el proceso de optimización con el método de Nelder y Mead y el número de iteraciones necesarias para completar el proceso.

En las figuras 4.58, 4.59, 4.60, y 4.61 se compara la evolución del contenido de nitrógeno nítrico en las 3 capas de suelo y en el conjunto del perfil para las mejores configuraciones obtenidas para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N. Así mismo, en la Tabla 4.29 se recogen los valores de los estadísticos obtenidos para estos ajustes.

Se observa que para la parcela Paterna-2 el modelo LEACHM tiende a infraestimar el contenido de nitrógeno en el suelo en la parte final del cultivo de la coliflor, mientras que el modelo EU-Rotate_N infraestima este contenido tras la cosecha y enterrado de residuos del cultivo. En cuanto a los estadísticos obtenidos, en este caso las diferencias medias oscilaron entre 13 y 37 kg N/ha y los RMSE obtenidos han variado entre 33 y 62 kg N/ha, que son valores más altos que los obtenidos en la parcela Paterna-1. Los valores de los demás estadísticos fueron similares en las dos parcelas.

Tabla 4.28: Valores iniciales y óptimos de los parámetros del nitrógeno para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N en Paterna-2

Parámetro	Valor inicial	Valor óptimo	Error	Iteraciones
Modelo LEACHM				
N5	0.7500	0.5392	1.0310	110
N3	0.6000	0.5040		
N10	0.0825	0.1348		
N13	0.0050	0.0018		
N1	4.6000	0.9814		
N4	0.3500	0.4577		
Modelo EU-Rotate_N				
N2	1.405E-04	2.7838E-04	1.4194	188
N1	4.35E-05	8.5235E-05		
N5	0.001	6.420E-04		
N10	0.1	0.092462		
N9	0.5	0.300140		
N3	0.001	9.78E-04		
N6	0.01	7.763E-03		

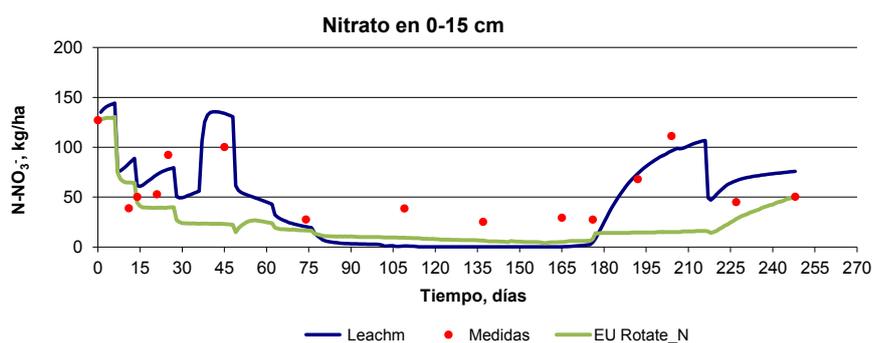


Figura 4.58: Evolución del contenido de nitrógeno nítrico de la capa 1 en Paterna-2

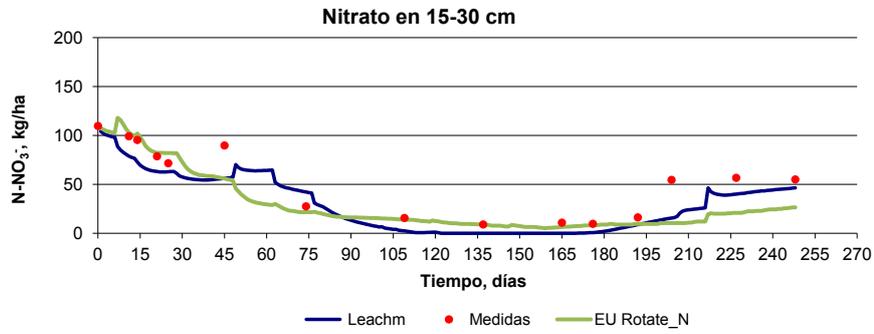


Figura 4.59: Evolución del contenido de nitrógeno nítrico de la capa 2 en Paterna-2

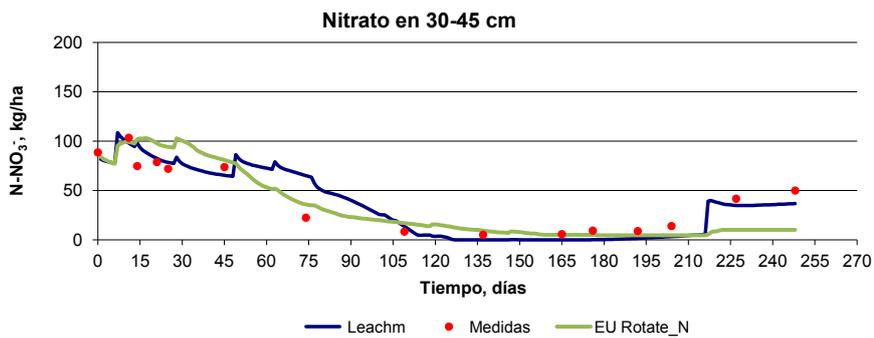


Figura 4.60: Evolución del contenido de nitrógeno nítrico de la capa 3 en Paterna-2

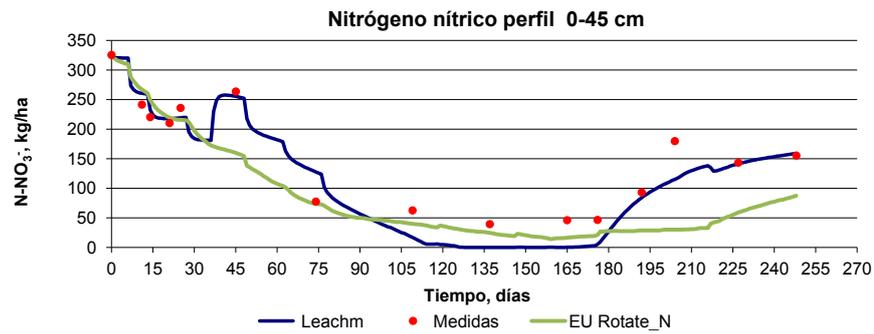


Figura 4.61: Evolución del contenido de nitrógeno nítrico en el perfil de suelo en Paterna-2

Tabla 4.29: Valores de los estadísticos obtenidos en la calibración de los parámetros del ciclo del nitrógeno de los modelos LEACHM y EU-Rotate_N para Paterna-2

Modelo LEACHM				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	5.68	14.27	-0.70	12.83
RMSE	15.54	18.82	14.83	32.87
NRMSE	0.29	0.38	0.37	0.23
R	0.80	0.93	0.92	0.95
pendiente	1.19	0.81	1.04	1.14
ordenada	-9.67	-4.69	-0.99	-32.50
d	0.89	0.91	0.96	0.96
Modelo EU-Rotate_N				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	32.72	9.86	-0.53	37.37
RMSE	31.35	19.75	18.25	61.68
NRMSE	0.58	0.40	0.45	0.43
R	0.13	0.88	0.90	0.84
pendiente	0.08	0.96	1.12	0.97
ordenada	21.49	-8.09	-4.27	-32.76
d	0.54	0.92	0.94	0.87

Tabla 4.30: Valores óptimos de los parámetros hidráulicos de los modelos LEACHM y EU-Rotate_N para Paterna-1

Modelo LEACHM		Modelo EU-Rotate_N	
Parámetro	Valor óptimo	Parámetro	Valor óptimo
b_1	4.73	$FC1$	0.361
b_2	8.41	$FC2$	0.264
b_3	18.66	$FC3$	0.308
		$CD3$	0.776

4.4 Capacidad predictiva de los modelos calibrados

Una de las principales utilidades que tiene el calibrar un modelo de simulación de la dinámica del agua y nitrógeno en el suelo, es poder usarlo como una herramienta de predicción de la evolución de estas variables y poder apoyar las recomendaciones de fertilización para el agricultor e incluso conocer en un momento determinado el contenido de nitrógeno en el suelo y así determinar las posibles necesidades de fertilización del cultivo.

Por ello, para evaluar la capacidad predictiva de los modelos una vez calibrados, en primer lugar, se utilizará la configuración de parámetros (agua y nitrógeno) que ha proporcionado un menor error al calibrar con los datos experimentales de la parcela Paterna-1 y se utilizarán los valores de estos parámetros para simular la evolución del contenido de agua y nitrógeno del suelo en la parcela Paterna-2. Así mismo, se utilizará también la configuración óptima de parámetros obtenida para la parcela Paterna-2 para la simulación de la evolución del agua y el nitrógeno en la parcela Paterna-1.

4.4.1 Predicción de la parcela Paterna-2

Para simular la evolución del contenido del agua en la parcela Paterna-2 se utilizarán los valores óptimos de los parámetros relacionados con la dinámica del agua presentados en la Tabla 4.30.

En las figuras 4.62, 4.63, 4.64, y 4.65 se compara la evolución de la humedad volumétrica en las 3 capas de suelo y en el conjunto del perfil predichos por para las mejores configuraciones obtenidas para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N. Así mismo, en la Tabla 4.31 se recogen los valores de los estadísticos obtenidos para estas predicciones.

En general, ambos modelos han predicho bien la lámina de agua en el suelo, aunque en las dos primeras capas los índices de acuerdo obtenidos son bajos y oscilan

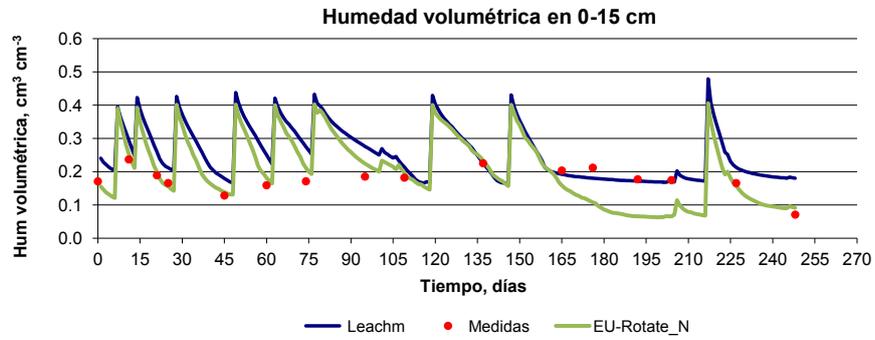


Figura 4.62: Predicción de la evolución de la humedad volumétrica en la capa 1 de Paterna-2

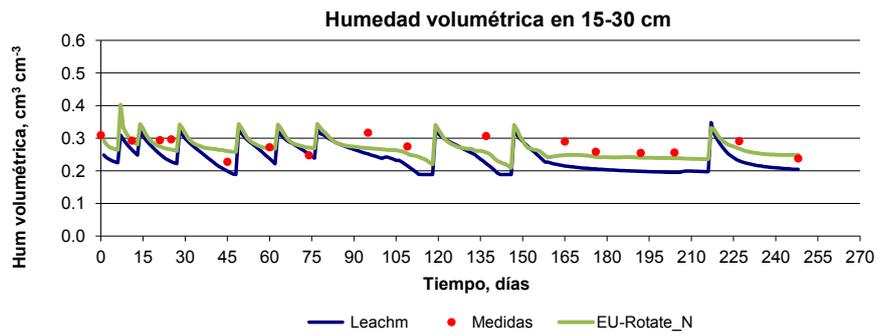


Figura 4.63: Predicción de la evolución de la humedad volumétrica en la capa 2 de Paterna-2

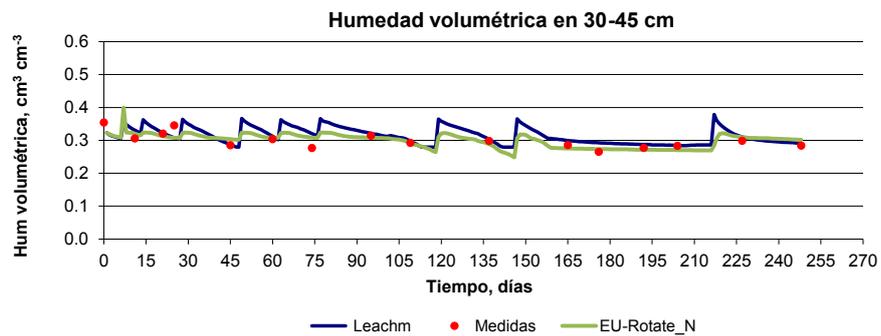


Figura 4.64: Predicción de la evolución de la humedad volumétrica en la capa 3 de Paterna-2

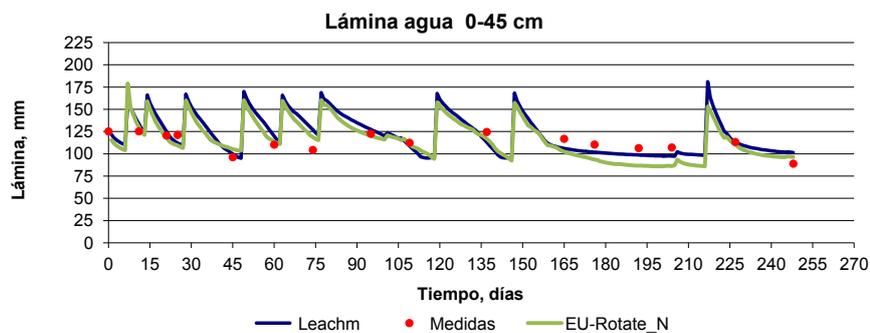


Figura 4.65: Predicción de la evolución de la lámina de agua en el perfil del suelo de Paterna-2

Tabla 4.31: Resultados de los estadísticos para la predicción de la evolución de la humedad en el suelo en Paterna-2

Modelo LEACHM				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	-0.0149	0.0496	-0.0088	-0.358
RMSE	0.0320	0.0541	0.0189	9.886
NRMSE	0.1816	0.1972	0.0637	0.088
R	0.3895	0.5890	0.5541	0.585
pendiente	0.4110	0.5016	0.4042	0.662
ordenada	0.1471	0.0872	0.1850	38.220
d	0.4386	0.4957	0.6809	0.762
Modelo EU-Rotate_N				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	0.0138	0.0145	-0.0010	4.088
RMSE	0.0532	0.0275	0.0163	8.422
NRMSE	0.3014	0.1002	0.0551	0.075
R	0.4920	0.4227	0.6030	0.574
pendiente	0.7368	0.2366	0.5006	0.701
ordenada	0.0327	0.1951	0.1487	29.398
d	0.6508	0.5735	0.7682	0.715

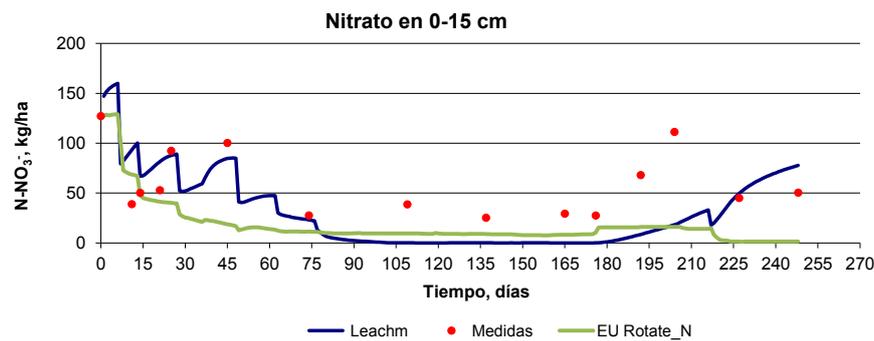
Tabla 4.32: Valores óptimos de los parámetros relacionados con el nitrógeno de los modelos LEACHM y EU-Rotate_N para Paterna-1

Modelo LEACHM		Modelo EU-Rotate_N	
Parámetro	Valor óptimo	Parámetro	Valor óptimo
N3	0.5867	N10	4.503E-02
N10	0.1218	N2	1.614E-04
N4	0.2610	N1	4.368E-05
N13	0.0010	N5	0.0010
N8	1.045E-04	N4	0.0104
N7	7.591E-05		
N5	0.0338		

entre 0.43 y 0.65, que son inferiores a los valores próximos a 0.7, obtenidos para el conjunto del perfil de suelo. Los valores de RMSE para la lámina de agua son inferiores a 10 mm y su valor normalizado (NRMSE), equivalente al porcentaje de error de la predicción, no supera el 9 %.

Por otra parte, para simular la evolución del contenido de nitrato en la parcela Paterna-2 se utilizarán los valores óptimos para los parámetros del nitrógeno que se muestran en la Tabla 4.32.

En las figuras 4.66, 4.67, 4.68, y 4.69 se compara la evolución del contenido de nitrato en las 3 capas de suelo y en el conjunto del perfil predichos por las mejores configuraciones obtenidas para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N. También se presentan los valores medidos. Así mismo, en la Tabla 4.33 se recogen los valores de los estadísticos obtenidos para estas predicciones.

**Figura 4.66:** Predicción de la evolución del contenido de nitrato en la capa 1 en Paterna-2

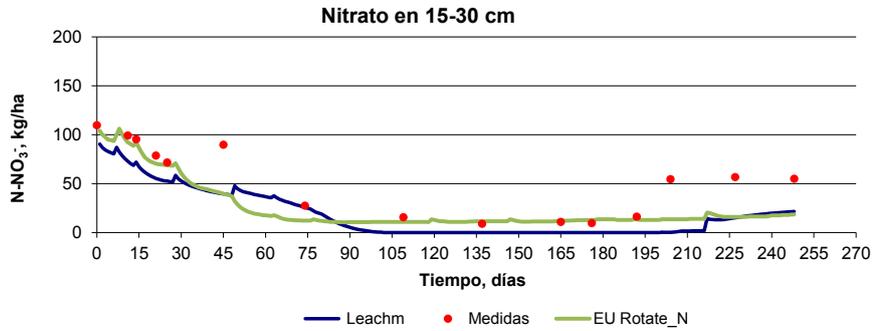


Figura 4.67: Predicción de la evolución del contenido de nitrato en la capa 2 en Paterna-2

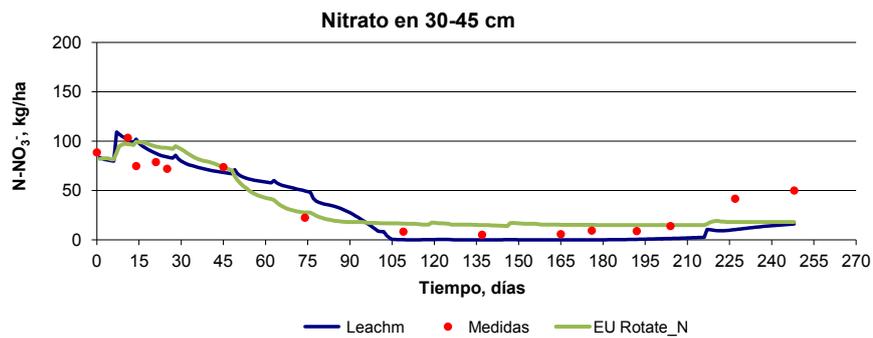


Figura 4.68: Predicción de la evolución del contenido de nitrato en la capa 3 en Paterna-2

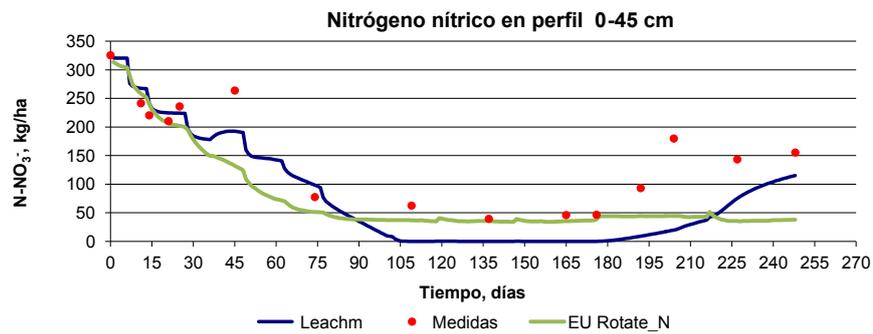


Figura 4.69: Predicción de la evolución del contenido de nitrato en el perfil del suelo en Paterna-2

Tabla 4.33: Resultados de los estadísticos para la predicción de la evolución del contenido de nitrato en el suelo en Paterna-2

Modelo LEACHM				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	28.93	23.93	3.34	39.11
RMSE	32.96	28.37	17.53	62.99
NRMSE	0.61	0.58	0.43	0.44
R	0.37	0.89	0.91	0.88
pendiente	0.50	0.73	1.13	1.12
ordenada	15.04	-10.67	-8.71	-56.18
d	0.54	0.81	0.94	0.88
Modelo EU-Rotate N				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	42.04	14.67	-3.26	44.07
RMSE	34.92	23.30	15.30	69.00
NRMSE	0.65	0.47	0.38	0.48
R	0.14	0.84	0.91	0.79
pendiente	0.10	0.79	1.00	0.84
ordenada	16.01	-4.13	3.45	-21.70
d	0.50	0.87	0.95	0.83

Tabla 4.34: Valores óptimos de los parámetros hidráulicos de los modelos LEACHM y EU-Rotate_N para Paterna-2

Modelo LEACHM		Modelo EU-Rotate_N	
Parámetro	Valor óptimo	Parámetro	Valor óptimo
$b1$	3.47	$FC1$	0.299
$b2$	12.18	$FC2$	0.286
$b3$	14.01	$FC3$	0.349
		$SAT1$	0.451

la predicción obtenida para la evolución del contenido de nitrógeno nítrico en el perfil de suelo en la primera capa ha sido inferior a las medidas de campo, especialmente en la parte final de la simulación, lo que se ha traducido en unas diferencias medias para el conjunto del perfil en torno a los 40 kgN/ha y unos valores de RMSE superiores a 60 kgN/ha. En este caso el error de la predicción dado por el valor del NRMSE aumenta considerablemente respecto al del agua, siendo del 44 % en el caso de LEACHM y del 48 % en el caso de EU-Rotate_N. No obstante los índices de acuerdo para las capas 2 y 3 el conjunto del perfil son elevados.

4.4.2 Predicción de la parcela Paterna-1

De la misma manera, para simular la evolución del contenido del agua en la parcela Paterna-1 se utilizarán los valores óptimos de los parámetros del agua presentados en la Tabla, 4.34, y que son los que menor error han proporcionado en el proceso de optimización realizado con los datos experimentales correspondientes al ensayo de Paterna-2.

En las figuras 4.70, 4.71, 4.72, y 4.73 se compara la evolución de la humedad volumétrica en las 3 capas de suelo y en el conjunto del perfil predichos por las mejores configuraciones obtenidas para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N. Así mismo, en la Tabla 4.35 se recogen los valores de los estadísticos obtenidos para estas predicciones de la parcela 1.

Los resultados muestran que el funcionamiento de LEACHM y EU-Rotate_N para simular la evolución de la lámina de agua es bueno, pero al estudiar cada capa por separado, se observa que LEACHM infraestima la humedad volumétrica de la capa 1, y sobreestima la humedad de la capa2. Sin embargo, el modelo EU-Rotate_N simula mejor la evolución de la humedad en ambas capas. Esto se refleja en un valor más alto del índice de acuerdo en este modelo al compararlo con el correspondiente índice del modelo LEACHM. La simulación de la evolución de la humedad predicha para Paterna-1 ha sido mejor que la predicha para Paterna-2.

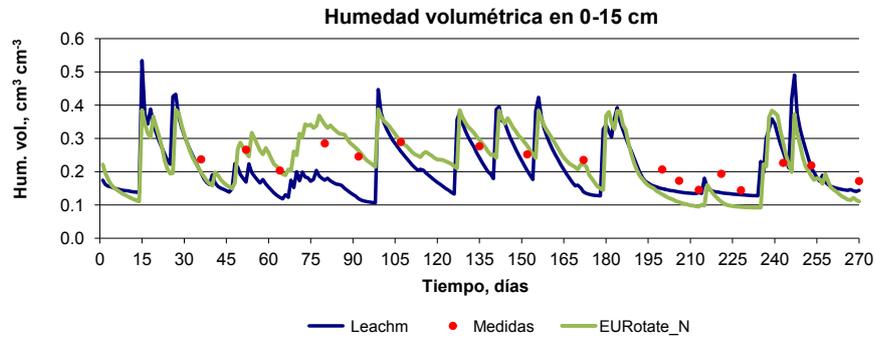


Figura 4.70: Predicción de la evolución de la humedad volumétrica en la capa 1 en Paterna-1

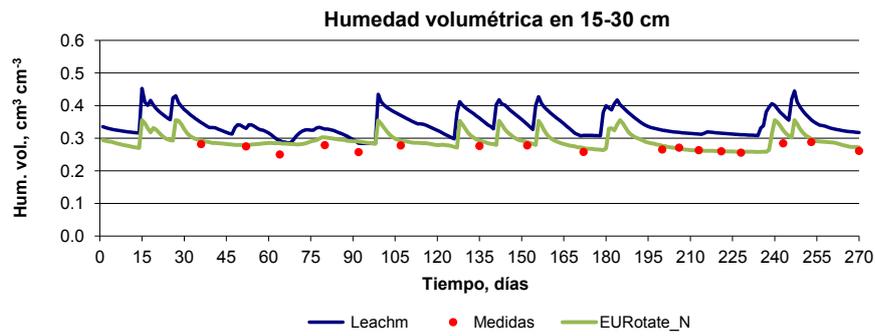


Figura 4.71: Predicción de la evolución de la humedad volumétrica en la capa 2 en Paterna-1

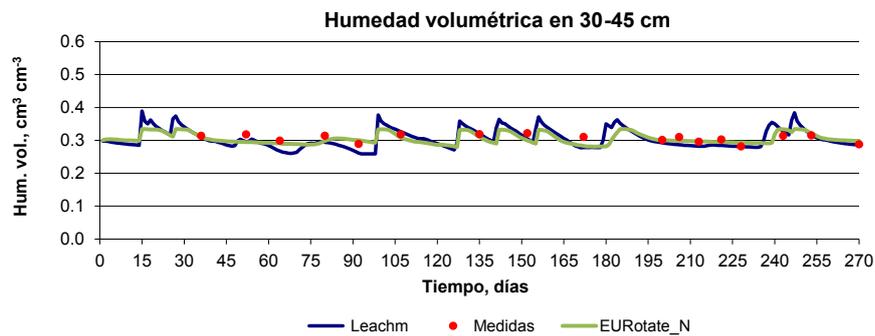


Figura 4.72: Predicción de la evolución de la humedad volumétrica en la capa 3 en Paterna-1

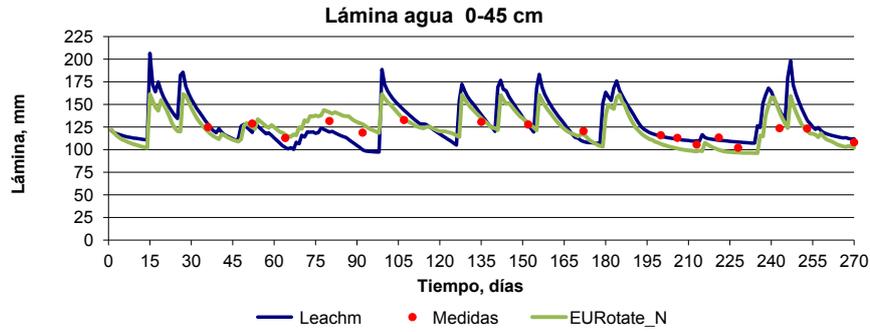


Figura 4.73: Predicción de la evolución de la lámina de agua en el perfil del suelo en Paterna-1

Tabla 4.35: Resultados de los estadísticos para la predicción de la evolución de la humedad del suelo en la parcela Paterna-1

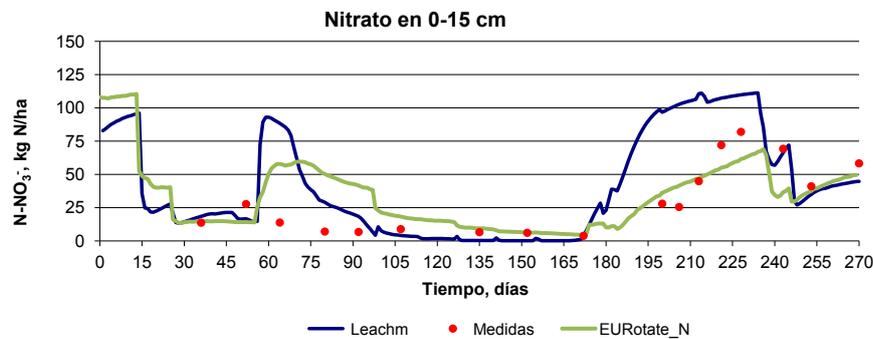
Modelo LEACHM				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	0.0300	-0.0596	0.0115	0.18
RMSE	0.0336	0.0617	0.0179	9.74
NRMSE	0.1766	0.2290	0.0583	0.08
R	0.5989	0.8702	0.7109	0.69
pendiente	0.6256	1.9518	1.1524	1.02
ordenada	0.0338	-0.1970	-0.0583	-2.15
d	0.8401	0.3052	0.7014	0.78
Modelo EU-Rotate_N				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	0.0410	-0.0137	0.0046	1.27
RMSE	0.0465	0.0183	0.0138	8.20
NRMSE	0.2443	0.0677	0.0452	0.07
R	0.9234	0.6879	0.3824	0.88
pendiente	1.6751	1.0320	0.3727	1.43
ordenada	-0.1671	0.0050	0.1877	-53.30
d	0.8239	0.6613	0.6173	0.88

Tabla 4.36: Valores óptimos de los parámetros relacionados con el nitrógeno de los modelos LEACHM y EU-Rotate_N para Paterna-2

Modelo LEACHM		Modelo EU-Rotate_N	
Parámetro	Valor óptimo	Parámetro	Valor óptimo
N5	0.5392	N2	2.784E-04
N3	0.5040	N1	8.524E-05
N10	0.1348	N5	6.420E-04
N13	0.0018	N10	0.0925
N1	0.9814	N9	0.3001
N4	0.4577	N3	9.778E-04
		N6	7.763E-03

Por otra parte, para simular la evolución del contenido de nitrato en la parcela Paterna-1 se utilizarán los valores óptimos para los parámetros del nitrógeno que se muestran en la Tabla 4.36.

En las figuras 4.74, 4.75, 4.76, y 4.77 se compara la evolución del contenido de nitrato en las 3 capas de suelo y en el conjunto del perfil predichos por las mejores configuraciones obtenidas para los modelos LEACHM y EU-Rotate_N. También se presentan los valores medidos. Así mismo, en la Tabla 4.37 se recogen los valores de los estadísticos obtenidos para estas predicciones.

**Figura 4.74:** Predicción de la evolución del contenido de nitrato en la capa 1 de Paterna-1

En la predicción obtenida para la evolución del contenido de nitrato en el perfil de suelo, se observa que ambos modelos sobreestiman la cantidad de contenido de nitrato en el suelo, principalmente en la época del cultivo, aunque LEACHM también sobreestima el nitrógeno en el suelo tras la incorporación de los residuos.

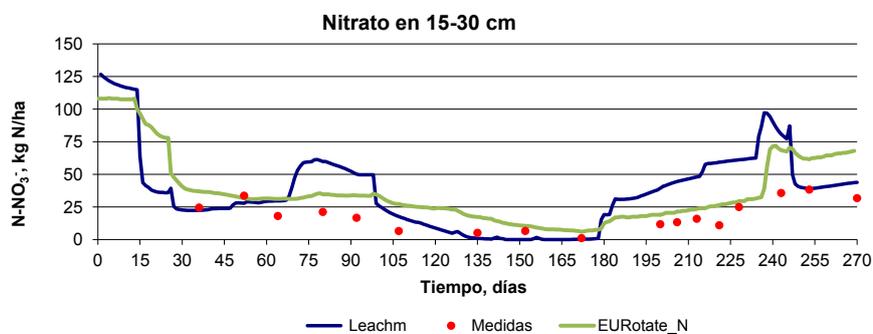


Figura 4.75: Predicción de la evolución del contenido de nitrato en la capa 2 de Paterna-1

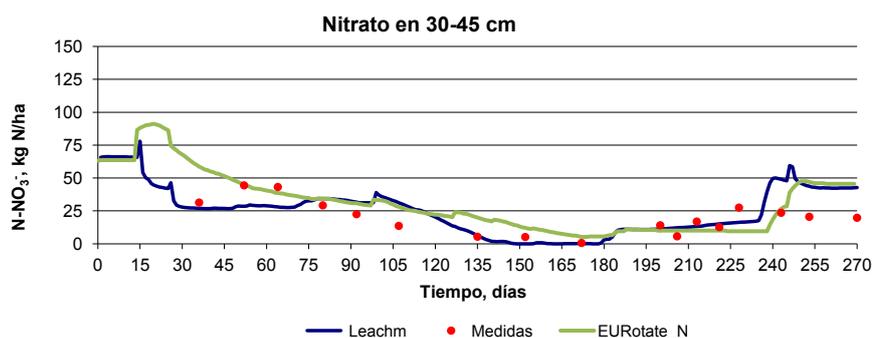


Figura 4.76: Predicción de la evolución del contenido de nitrato en la capa 3 de Paterna-1

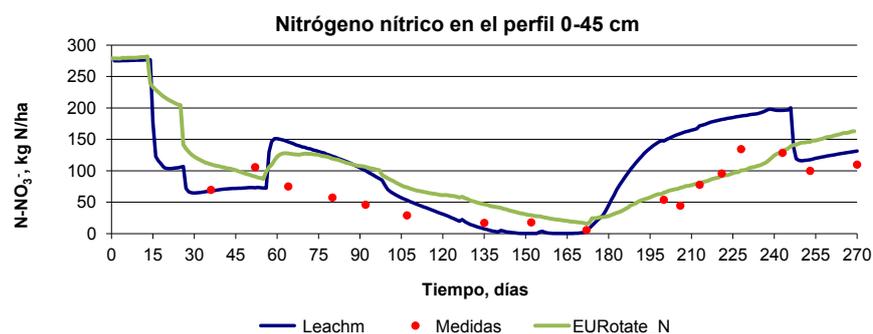


Figura 4.77: Predicción de la evolución del contenido de nitrato en el perfil del suelo de Paterna-1

Tabla 4.37: Resultados de los estadísticos para la predicción de la evolución del contenido de nitrato en el suelo en la parcela Paterna-1

Modelo LEACHM				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	-27.99	-18.15	-3.19	-41.18
RMSE	31.86	26.07	12.96	59.75
NRMSE	0.68	1.40	0.66	0.87
R	0.66	0.56	0.58	0.74
pendiente	1.10	1.15	0.68	1.23
ordenada	16.83	15.35	9.46	25.42
d	0.72	0.52	0.72	0.70
Modelo EU-Rotate N				
Estadístico	capa 1	capa 2	capa 3	perfil
dif. media	7.27	-13.70	-6.38	-23.53
RMSE	21.53	17.00	13.92	36.76
NRMSE	0.46	0.91	0.70	0.54
R	0.57	0.86	0.66	0.73
pendiente	0.41	1.39	0.89	0.73
ordenada	21.32	6.37	8.65	41.73
d	0.87	0.72	0.75	0.78

Los índices de acuerdo de la predicción obtenida están en torno a 0.75, siendo menores que los índices obtenidos en la predicción de Paterna-2.

Capítulo 5

Conclusiones

Los modelos de simulación del transporte de agua y nitrógeno en el suelo, pueden ser unas herramientas útiles para tomar decisiones a cerca del manejo del riego y la fertilización de los cultivos. Para ello, es necesario la calibración de los modelos para las condiciones de clima, suelo y cultivo donde se vayan a utilizar. Para la calibración de estos modelos se hace uso de medidas experimentales que se han de recoger en una explotación típica. Estas medidas, en general, son costosas desde el punto de vista del tiempo requerido, el coste económico y las interferencias con el desarrollo de las labores habituales del cultivo que realiza el agricultor. Por ello, el número de datos experimentales disponibles no es muy alto.

La calibración de modelos de transporte de agua y nitrógeno como los modelos LEACHM y EU-Rotate_N, que se han estudiado en este trabajo requiere la determinación de un elevado número de parámetros a partir de los datos experimentales disponibles, que no son muy numerosos. En esta situación se produce el problema de sobreparametrización del modelo y es necesario reducir de algún modo el número de parámetros a calibrar y para ello, es necesario disponer de un criterio de elección de qué parámetros se utilizan en el proceso de optimización asociado a la calibración.

En este trabajo se han evaluado dos métodos de análisis de sensibilidad global de un modelo, el método LH-OAT y el método FAST, para determinar cuales son los parámetros más sensibles de los modelos LEACHN y EU-Rotate_N, que simulan el comportamiento del agua y nitrógeno en el suelo de dos parcelas cultivadas con coliflor en dos periodos de cultivo consecutivos. Tras la determinación de los parámetros más importantes para la dinámica del agua y el ciclo del nitrógeno en el suelo, se ha procedido a la calibración de estos modelos. Con los modelos calibrados se ha realizado la predicción de la evolución de la humedad y el contenido de nitrato en el suelo.

El análisis se ha realizado primero para el modelo de la dinámica del agua y, tras su calibración se ha procedido a hacer un análisis similar para el modelo del nitrógeno. De los resultados obtenidos se concluye que los dos métodos de análisis de sensibilidad utilizados, han permitido encontrar los mismos parámetros hidráulicos dominantes, tanto para el modelo LEACHM como para el EU-Rotate_N. El parámetro del modelo LEACHN más influyente sobre el contenido de agua en el suelo ha sido el exponente b de la ecuación de Campbell para cada una de las tres capas de suelo utilizadas en la simulación. Mientras que en el modelo EU-Rotate_N el parámetro más influyente sobre el contenido de agua en el suelo ha sido la humedad volumétrica a capacidad de campo para cada una de las tres capas de suelo utilizadas en la simulación.

Utilizando estos parámetros en el proceso de optimización, se ha obtenido la calibración de los parámetros del agua de LEACHM y EU-Rotate_N. Los dos modelos, una vez calibrados han simulado bien la evolución del contenido de agua en el suelo, tanto en el periodo utilizado para la calibración, como en las predicciones realizadas.

Los parámetros relacionados con el ciclo del nitrógeno presentaron mayor grado de interacción, dificultando la elección de los parámetros más sensibles de cada modelo. De este modo, se han obtenido discrepancias sobre qué parámetros son los más influyentes sobre el error al utilizar el método LH-OAT y al utilizar el método FAST. Según el criterio dado por el método LH-OAT el parámetro más sensible del modelo LEACHN sobre el nitrógeno mineral del suelo es el factor de eficiencia de síntesis y según el criterio dado por el método FAST es la tasa de nitrificación. Para el modelo EU-Rotate_N el método LH-OAT proporciona como parámetro más influyente la fracción lábil de residuos mientras que el método FAST indica como factor más influyente la tasa de nitrificación. Utilizando ambos criterios se ha determinado la configuración de parámetros óptima para el ciclo del nitrógeno consiguiendo un ajuste razonable para el modelo, que permite predicciones de la evolución del nitrógeno con un margen de error superior que el que se ha conseguido para las predicciones de humedad del suelo.

El resultado obtenido para los parámetros relacionados con el ciclo del nitrógeno en el suelo sugieren la necesidad de estudiar nuevos métodos de análisis de sensibilidad que tengan en cuenta la evolución temporal de la salida usando índices de sensibilidad de modelos con salidas vectoriales. Otra posibilidad, de estudio, consiste en realizar el análisis y calibración en ventanas temporales correspondientes a los distintos periodos que se dan en el cultivo, como la preparación del terreno, el cultivo y el enterrado de residuos tras la cosecha, ya que los procesos que intervienen en cada una de estas fases son distintos. Este tipo de análisis requeriría de un número suficiente de medidas en cada una de las etapas.

Bibliografía

- [1] Richard G Allen y col. “Crop evapotranspiration-Guidelines for computing crop water requirements-FAO Irrigation and drainage paper 56”. En: *FAO, Rome* 300.9 (1998), pág. D05109.
- [2] AK Alva y col. “Nitrogen best management practice for citrus trees: II. Nitrogen fate, transport, and components of N budget”. En: *Scientia Horticulturae* 109.3 (2006), págs. 223-233.
- [3] Maksat Ashyraliyev y col. “Systems biology: parameter estimation for biochemical models”. En: *Febs Journal* 276.4 (2009), págs. 886-902.
- [4] Nadine Brisson y col. “STICS: a generic model for the simulation of crops and their water and nitrogen balances. I. Theory and parameterization applied to wheat and corn”. En: *Agronomie* 18.5-6 (1998), págs. 311-346.
- [5] R. C. Rahn y col. “The Development of the EU-Rotate_N Model and its use to Test Strategies for Nitrogen Use Across Europe”. En: *IV International Symposium on Ecologically Sound Fertilization Strategies for Field Vegetable Production* 852. 2008, págs. 73-76.
- [6] Flavio Cannavó. “Sensitivity analysis for volcanic source modeling quality assessment and model selection”. En: *Computers & Geosciences* 44 (2012), págs. 52-59.
- [7] P. Cannavo y col. “Modeling N Dynamics to Assess Environmental Impacts of Cropped Soils”. En: ed. por Donald L. Sparks. Vol. 97. *Advances in Agronomy*. Academic Press, 2008, págs. 131-174. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/S0065-2113\(07\)00004-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0065-2113(07)00004-1).
- [8] SWt Childs y RJ Hanks. “Model of soil salinity effects on crop growth”. En: *Soil Science Society of America Journal* 39.4 (1975), págs. 617-622.

- [9] AR Conn, K Scheinberg y LN Vicente. *Introduction to derivative-free optimization*. SIAM, 2009.
- [10] Wilson A Contreras y col. “Compartmental model for nitrogen dynamics in citrus orchards”. En: *Mathematical and Computer Modelling* 50.5 (2009), págs. 794-805.
- [11] RI Cukier, JH Schaibly y Kurt E Shuler. “Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. III. Analysis of the approximations”. En: *The Journal of Chemical Physics* 63.3 (1975), págs. 1140-1149.
- [12] RI Cukier y col. “Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. I Theory”. En: *The Journal of Chemical Physics* 59.8 (1973), págs. 3873-3878.
- [13] JM De Paz, C Albert y JA Delgado. “NLEAP-GIS Modeling in a Mediterranean Region of Spain”. En: *Proceedings of the 16th Nitrogen Workshop Connecting Different Scales of Nitrogen Use in Agriculture, Turin*. 2009, págs. 515-516.
- [14] JA Delgado, M Shaffer y MK Brodahl. “New NLEAP for shallow and deep rooted rotations: Irrigated agriculture in the San Luis Valley of south central Colorado”. En: *Journal of soil and water conservation* 53.4 (1998), págs. 338-340.
- [15] Regina Ferrer Ferrer. “Evaluación medioambiental mediante simulación de la lixiviación de nitratos en un huerto de cítricos en Carcaixent con diferentes tratamientos de abonado mineral y orgánico”. Tesis de mtría. Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Caminos, Canales y Puertos, Universitat Politècnica de València, 2010.
- [16] DE Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley Professional, New York, NY, 1989.
- [17] Claudia Ximena Jaramillo González. “Mineralización de la gallinaza y de los restos de cosecha en el suelo. Aplicación al cultivo de coliflor en la huerta de Valencia”. Tesis doct. Universitat Politècnica de València, 2015.
- [18] Bruce Hajek. “Cooling schedules for optimal annealing”. En: *Mathematics of operations research* 13.2 (1988), págs. 311-329.
- [19] S Hansen, HE Jensen y NE Nielsen. “DAISY: soil plant atmosphere system model”. En: *NPo-forskning fra Miljøstyrelsen* A10 (1990).

- [20] CB Harrison y col. "Impact of alternative citrus management practices on groundwater nitrate in the Central Florida Ridge: II. Numerical modeling". En: *Transactions of the ASAE* 42.6 (1999), págs. 1669-1678.
- [21] C Hénault y col. "Predicting in situ soil N₂O emission using NOE algorithm and soil database". En: *Global Change Biology* 11.1 (2005), págs. 115-127.
- [22] Robert W Hill, J Hanks, JT Ritchie y col. "Irrigation scheduling." En: *Modeling plant and soil systems*. (1991), págs. 491-509.
- [23] JL Hutson y RJ Wagenet. "Simulating nitrogen dynamics in soils using a deterministic model". En: *Soil Use and Management* 7.2 (1991), págs. 74-78.
- [24] JL Hutson y RJ Wagenet. "Simulating nitrogen dynamics in soils using a deterministic model". En: *Soil Use and Management* 7.2 (1991), págs. 74-78.
- [25] John L Hutson. "LEACHM, model description and user's guide". En: *School of chemistry, physics, and earth sciences. The Flinders Univ. of South Australia, Adelaide* (2003).
- [26] Martin K van Ittersum y col. "On approaches and applications of the Wageningen crop models". En: *European Journal of Agronomy* 18.3 (2003), págs. 201-234.
- [27] Jalal D Jabro y col. "Evaluation of nitrogen version of LEACHM for predicting nitrate leaching". En: *Soil science* 160.3 (1995), págs. 209-217.
- [28] H. Johnsson y col. "Simulated nitrogen dynamics and losses in a layered agricultural soil". En: *Agriculture, Ecosystems and Environment* 18 (1987), págs. 333-356.
- [29] C.A. Jones y J.R. Kiniry. *Ceres-N Maize: A Simulation Model of Maize Growth and Development*. Texas A&M University Press, Collage Station, 1986.
- [30] Young Wook Jung y col. "Calibration of LEACHN model using LH-OAT sensitivity analysis". En: *Nutrient Cycling in Agroecosystems* 87.2 (2010), págs. 261-275.
- [31] Carl T Kelley. *Iterative methods for optimization*. SIAM, 1999.
- [32] Scott Kirkpatrick, C Daniel Gelatt, Mario P Vecchi y col. "Optimization by simulated annealing". En: *science* 220.4598 (1983), págs. 671-680.

- [33] Tamara G Kolda, Robert Michael Lewis y Virginia Torczon. "Optimization by direct search: New perspectives on some classical and modern methods". En: *SIAM review* 45.3 (2003), págs. 385-482.
- [34] E Le Cadre. "Modélisation de la volatilisation d'ammoniac en interaction avec les processus chimiques et biologiques du sol: le modèle Volt'AIR". En: *Ecole doctorale ABIES. Paris, France, INA-PG, 211pp* (2004).
- [35] A Lidón y col. "Influencia de la calibración de los parámetros hidráulicos del modelo EU-ROTATE_N en el balance de N en un cultivo de col china". En: vol. 61. Acta de Horticultura. Sociedad Española de ciencias hortícolas, 2011, págs. 45-51.
- [36] Antonio Lidón, Carlos Ramos y Alfredo Rodrigo. "Comparison of drainage estimation methods in irrigated citrus orchards". En: *Irrigation science* 19.1 (1999), págs. 25-36.
- [37] Antonio Lidón y col. "Assessment of LEACHN and a simple compartmental model to simulate nitrogen dynamics in citrus orchards". En: *Agricultural water management* 121 (2013), págs. 42-53.
- [38] MC Martínez-Ballesta y col. "Minerals in plant food: effect of agricultural practices and role in human health. A review". En: *Agronomy for sustainable development* 30.2 (2010), págs. 295-309.
- [39] B Mary y col. "Calculation of nitrogen mineralization and leaching in fallow soil using a simple dynamic model". En: *European Journal of Soil Science* 50.4 (1999), págs. 549-566.
- [40] Michael D McKay. *Sensitivity and uncertainty analysis using a statistical sample of input values*. CRC, Boca Raton, FL, 1988, págs. 145-186.
- [41] RG McLaren y KC Cameron. "Sustainable Production and Environmental Protection". En: *Soil Science* (1996), pág. 234.
- [42] CR Meinardi y col. "Vulnerability to diffuse pollution and average nitrate contamination of European soils and groundwater". En: *Water Science and Technology* 31.8 (1995), págs. 159-165.
- [43] Hervé Monod, Cédric Naud y David Makowski. "Uncertainty and sensitivity analysis for crop models". En: *Working with Dynamic Crop Models*. Ed. por Daniel Wallach, David Makowski y James W. Jones. Elsevier, 2006.

- [44] NRCS. *Estimation of direct runoff from storm rainfall*. In: *National Engineering Handbook, Part 630 Hydrology*. USDA, 2004.
- [45] JE Nash y Jonh V Sutcliffe. "River flow forecasting through conceptual models part I-A discussion of principles". En: *Journal of hydrology* 10.3 (1970), págs. 282-290.
- [46] JJ Neeteson y OT Carton. "The environmental impact of nitrogen in field vegetable production". En: *International Conference on Environmental Problems A ssociated with Nitrogen Fertilisation of Field Grown Vegetable Crops 563*. 1999, págs. 21-28.
- [47] JA Nelder y Mead R. "A simplex method for function minimization". En: *The Computer Journal* 7 (1965), págs. 308-313.
- [48] MN Nimah y RJ Hanks. "Model for estimating soil water, plant, and atmospheric interrelations: I. Description and sensitivity". En: *Soil Science Society of America Journal* 37.4 (1973), págs. 522-527.
- [49] Protection Officer. "Food and Agriculture organization of the United Nations". En: (2016).
- [50] M Paches y A Lidón. "Uso de un modelo de transporte de agua y solutos como apoyo a la recomendación del abonado nitrogenado en cítricos". En: *I Jornadas del grupo de fertilización de la SECH*. Vol. 44. Sistemas de recomendación de abonado. Sociedad Española de ciencias hortícolas, 2005, págs. 117-124.
- [51] Gary M Pierzynski, George F Vance y J Thomas Sims. *Soils and environmental quality*. CRC press, 2005.
- [52] CR Rahn y col. "Development of a model based decision support system to optimise nitrogen use in horticultural crop rotations across Europe EU-ROTATE_N". En: *Final Scientific Report QLK5-2002-01100, Wellesbourne* (2007).
- [53] CR Rahn y col. "Using the EU-Rotate_N model to forecast the effects of nitrate legislation on the economic output and environmental benefits in crop rotations". En: *Mineral versus organic fertilization: Conflict or synergism* (2007), págs. 433-439.
- [54] Clive Rahn y col. "EU-Rotate_N a decision support system to predict environmental and economic consequences of the management of nitrogen ferti-

- liser in crop rotations”. En: *European Journal of Horticultural Science* 75.1 (2010).
- [55] JT Ritchie. “Soil water balance and plant water stress”. En: *Understanding options for agricultural production*. Springer, 1998, págs. 41-54.
- [56] Maria Rodriguez-Fernandez, Pedro Mendes y Julio R Banga. “A hybrid approach for efficient and robust parameter estimation in biochemical pathways”. En: *Biosystems* 83.2 (2006), págs. 248-265.
- [57] DA Rose. “Water movement in porous materials III. Evaporation of water from soil”. En: *Journal of Physics D: Applied Physics* 1.12 (1968), pág. 1779.
- [58] A Saltelli, K Chan y EM Scott. *Sensitivity Analysis*. Wiley, Chichester, NY, 2000.
- [59] Andrea Saltelli, Stefano Tarantola y KP-S Chan. “A quantitative model-independent method for global sensitivity analysis of model output”. En: *Technometrics* 41.1 (1999), págs. 39-56.
- [60] Andrea Saltelli y col. *Global sensitivity analysis: the primer*. John Wiley & Sons, 2008.
- [61] Andrea Saltelli y col. “Sensitivity analysis for chemical models”. En: *Chemical reviews* 105.7 (2005), págs. 2811-2828.
- [62] Andrea Saltelli y col. *Sensitivity analysis in practice: a guide to assessing scientific models*. John Wiley & Sons, 2004.
- [63] Andrea Saltelli y col. “Sensitivity analysis practices: Strategies for model-based inference”. En: *Reliability Engineering & System Safety* 91.10 (2006), págs. 1109-1125.
- [64] C Santhi y col. *Validation of the SWAT Model on a Large River Basin with Point and Nonpoint Sources*. 2001.
- [65] KE Saxton y col. “Estimating generalized soil-water characteristics from texture”. En: *Soil Science Society of America Journal* 50.4 (1986), págs. 1031-1036.
- [66] G.A.F. Seber y C.J. Wild. *Nonlinear regression*. John Wiley & Sons Inc. New York. NY, 1988.

- [67] J Simunek, M Th Van Genuchten y M Sejna. “The HYDRUS software package for simulating the two-and three-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media”. En: *Technical manual 1* (2006).
- [68] Henning Tangen Sogaard y col. “Ammonia volatilization from field-applied animal slurry:the ALFAM model”. En: *Atmospheric Environment* 36.20 (2002), págs. 3309-3319.
- [69] Jean M Sogbedji y col. “Evaluation of the PNM model for simulating drain flow nitrate-N concentration under manure-fertilized maize”. En: *Plant and soil* 282.1-2 (2006), págs. 343-360.
- [70] EC Stegman y col. “Irrigation water management.” En: *Design and operation of farm irrigation systems*. (1980), págs. 763-816.
- [71] Claudio O Stöckle, Marcello Donatelli y Roger Nelson. “CropSyst, a cropping systems simulation model”. En: *European journal of agronomy* 18.3 (2003), págs. 289-307.
- [72] RZWQM Development Team y col. “RZWQM: Simulating the effects of management on water quality and crop production”. En: *Agricultural Systems* 57.2 (1998), págs. 161-195.
- [73] A Van Griensven y col. “A global sensitivity analysis tool for the parameters of multi-variable catchment models”. En: *Journal of hydrology* 324.1 (2006), págs. 10-23.
- [74] A Van Griensven y col. “A global sensitivity analysis tool for the parameters of multi-variable catchment models”. En: *Journal of hydrology* 324.1 (2006), págs. 10-23.
- [75] Arthur W Warrick. *Soil physics companion*. CRC press, 2001.
- [76] TH Webb y LR Lilburne. “Use od the LEACHM model and DRASTIC index to map relative risk of groundwater contamination by pesticide leaching”. En: *Journal of Hydrology (New Zeland)* 38.2 (1999), págs. 271-288.
- [77] Gerald Whittaker y col. “Detection of overparameterization and overfitting in an automatic calibration of SWAT”. En: *Transactions of the ASABE* 53.5 (2010), págs. 1487-1499.

- [78] JR Williams, J Hanks, JT Ritchie y col. “Runoff and water erosion.” En: *Modeling plant and soil systems*. (1991), págs. 439-455.
- [79] Cort J Willmott. “On the validation of models”. En: *Physical geography 2.2* (1981), págs. 184-194.
- [80] Dejun Yang y col. “An easily implemented agro-hydrological procedure with dynamic root simulation for water transfer in the crop–soil system: validation and application”. En: *Journal of Hydrology* 370.1 (2009), págs. 177-190.
- [81] MA Youssef y col. “The nitrogen simulation model, DRAINMOD-N II”. En: *Transactions of the ASAE* 48.2 (2005), págs. 611-626.