

Modelación Numérica para el Análisis del Transporte de Glifosato en
Suelos Agrícolas

2024

Jesús Miguel García Gallego



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería

Modelación Numérica para el Análisis del
Transporte de Glifosato en Suelos Agrícolas

Tesis

Que como parte de los requisitos para
obtener el Grado de

Maestro en Ciencias (Hidrología Ambiental)

Presenta

Ing. Jesús Miguel García Gallego

Dirigido por:

M.C. Sebastián Fuentes Castro

Co-Director:

Dr. Teobaldis Mercado Fernández

Querétaro, Qro. a: 13 de diciembre de 2024

La presente obra está bajo la licencia:
<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/deed.es>



CC BY-NC-ND 4.0 DEED

Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional

Usted es libre de:

Compartir — copiar y redistribuir el material en cualquier medio o formato

La licenciante no puede revocar estas libertades en tanto usted siga los términos de la licencia

Bajo los siguientes términos:



Atribución — Usted debe dar [crédito de manera adecuada](#), brindar un enlace a la licencia, e [indicar si se han realizado cambios](#). Puede hacerlo en cualquier forma razonable, pero no de forma tal que sugiera que usted o su uso tienen el apoyo de la licenciante.



NoComercial — Usted no puede hacer uso del material con [propósitos comerciales](#).



SinDerivadas — Si [remezcla, transforma o crea a partir](#) del material, no podrá distribuir el material modificado.

No hay restricciones adicionales — No puede aplicar términos legales ni [medidas tecnológicas](#) que restrinjan legalmente a otras a hacer cualquier uso permitido por la licencia.

Avisos:

No tiene que cumplir con la licencia para elementos del material en el dominio público o cuando su uso esté permitido por una [excepción o limitación](#) aplicable.

No se dan garantías. La licencia podría no darle todos los permisos que necesita para el uso que tenga previsto. Por ejemplo, otros derechos como [publicidad, privacidad, o derechos morales](#) pueden limitar la forma en que utilice el material.



Universidad Autónoma de Querétaro
Facultad de Ingeniería
Maestría en Ciencias (Hidrología Ambiental)

Modelación Numérica para el Análisis del Transporte de
Glifosato en Suelos Agrícolas

Tesis

Que como parte de los requisitos para obtener el Grado de

Maestro en Ciencias (Hidrología Ambiental)

Presenta

Ing. Jesús Miguel García Gallego

Dirigido por:

M.C. Sebastián Fuentes Castro

Co-Director:

Dr. Teobaldis Mercado Fernández

M.C. Sebastián Fuentes Castro
Presidente

Firma

Dr. Teobaldis Mercado Fernández
Secretario

Firma

Dr. Carlos Alberto Chávez García
Vocal

Firma

Dr. Eusebio Jr. Ventura Ramos
Suplente

Firma

Dr. Martín Alfonso Gutiérrez López
Suplente

Firma

DEDICATORIA

A mi madre Virginia, cuyo abrazo me cobijó a más de 2945 km de distancia.

A mi abuelo José María, que siempre creyó en mí y me cuida desde el cielo.

AGRADECIMIENTOS

A Dios todopoderoso, por acompañarme en todo momento, guiar mis pasos en esta etapa de mi carrera y proporcionarme la sabiduría suficiente durante el desarrollo del trabajo de investigación.

Al M.C. Sebastián Fuentes Castro, por ser mi director y compañero en este camino, su dedicación al trabajo e invaluable aporte a mi vida personal y profesional.

Al Dr. Teobaldis Mercado Fernández, por impulsarme a dar el este nuevo paso en mi vida profesional, por ser mi codirector y acompañarme con su valioso conocimiento durante todo el trabajo de investigación.

Al Dr. Carlos Chávez García, por su incalculable aporte y apoyo en todo el trabajo, especialmente durante las fases de campo, laboratorio y de modelación numérica.

Al Dr. Eusebio Jr. Ventura Ramos y al Laboratorio GRUTAR de la Universidad Autónoma de Querétaro, por su colaboración incondicional durante los procedimientos realizados en laboratorio y sus conocimientos aportados al trabajo.

Al Dr. Alfonso Gutiérrez López y al M.C.C. Daniel Cantón Enríquez por todo su apoyo durante el proceso, especialmente en la fase de modelación numérica.

Al Dr. José de Jesús Treviño Reséndez, al Dr. Josué García Espinoza y a todo el personal del Centro de Investigación en Química para la Economía Circular (CIQEC) de la Universidad Autónoma de Querétaro, por su invaluable apoyo y colaboración en el análisis de glifosato en suelos y lixiviados.

Al Dr. Enrique Combatt Caballero, al Laboratorio de Suelos y Aguas y al Laboratorio de Física de Suelos de la Universidad de Córdoba por toda la colaboración prestada y su incalculable apoyo en la fase de experimentación y en la determinación de las características fisicoquímicas del suelo.

Al Laboratorio de Servicios Ambientales de la Universidad de Cartagena, por su especial colaboración en la determinación de glifosato en el suelo y lixiviado.

A mis amigos y compañeros de la Maestría en Ciencias, Adhareli, Marisol, Itzel, Elizabeth, Misael, Clertine, Efraín, Manuel, Daylin, Jonathan, Francisco, Juan Sebastián y César por su apoyo y acompañamiento en todo el proceso, no pude estar rodeado de mejores personas.

A mi madre Virginia, mi padre Julio, mis hermanos Pilar, Sadan, Alan y Zeyla, mi tía Elena, mi tía Ketty, mi prima María Paz, a mis abuelas y a toda mi familia y por confiar siempre en mí y acompañarme en cada paso de este camino.

A mis amigos de Colombia, el grupo de “Nojotros y Estrellitas” y el grupo de “Los Extraditables” por motivarme en todo momento y creer siempre en mí.

A la Facultad de Ingeniería y la Universidad Autónoma de Querétaro, por permitirme ser parte de su cuerpo de alumnos y brindarme todas las herramientas para desarrollar mi trabajo de grado.

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías – Conahcyt, por financiar mis estudios de Maestría e impulsar la investigación y el desarrollo de la ciencia y la tecnología en México.

ÍNDICE

RESUMEN.....	12
ABSTRACT	13
I. INTRODUCCIÓN.....	14
II. OBJETIVOS	17
1. Objetivo General:.....	17
2. Objetivos Específicos:.....	17
III. HIPÓTESIS.....	18
IV. ANTECEDENTES.....	19
1. Comportamiento de los pesticidas en el suelo	19
2. Modelación del transporte de contaminantes en el suelo.....	22
V. MARCO TEÓRICO.....	30
1. Modelación numérica.....	30
2. Movimiento del agua en el suelo.....	30
3. La ecuación de Richards	31
4. Características hidrodinámicas del suelo	32
4.1. Curva de Retención de Humedad (CRH)	32
4.2. Curva de Conductividad Hidráulica	33
5. Métodos de obtención de las características hidrodinámicas del suelo	35
5.1. Métodos Directos	35
5.2. Métodos indirectos	35
5.3. Métodos Inversos	36
6. Modelación de transporte de contaminantes.....	37
6.1. Discretización del modelo.....	38
6.2. Malla numérica.....	39
6.3. Condiciones iniciales.....	40
6.4. Condiciones de frontera	41
VI. METODOLOGÍA	42
1. Área de estudio.....	42
2. Evaluación de las características fisicoquímicas de los suelos	43
2.1. Clasificación de los tipos de suelos a utilizar	43

3.	Determinación de las características hidrodinámicas del suelo: curva de retención de humedad y curva de conductividad hidráulica.....	48
3.1.	Fase de modelación numérica	48
3.1.2.	Estimación de la curva de conductividad hidráulica.....	50
3.2.	Solución numérica de Richards: Diferencias finitas en una dimensión 52	
3.3.	Solución numérica de Advección-Dispersión: Diferencias finitas en una dimensión	58
4.	Estimación del coeficiente de dispersividad del glifosato en los suelos agrícolas	62
4.1.	Modelo de infiltración de glifosato en los suelos	62
5.	Evaluación de la vulnerabilidad de los suelos agrícolas ante la acción del glifosato.....	64
6.	Análisis estadísticos	65
VII.	RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....	66
1.	Características de los suelos agrícolas.....	66
1.1.	Concentración inicial de glifosato en los suelos.....	70
1.2.	Curva Granulométrica de los suelos estudiados.....	71
2.	Características hidrodinámicas de los suelos: Curvas de Retención de Humedad y Conductividad Hidráulica.....	73
2.1.	Pruebas de infiltración	73
2.2.	Ajuste de los parámetros para la optimización de la lámina infiltrada 75	
2.3.	Curva de Retención de Humedad y de Conductividad Hidráulica.	77
2.4.	Perfil de humedad del suelo: Modelación de la transferencia de agua 81	
3.	Coeficiente de dispersividad del glifosato en los suelos agrícolas: Modelación del transporte de solutos	84
3.1.	Concentración de glifosato a diferentes profundidades y en lixiviados.....	84
3.2.	Modelación del transporte de glifosato en los suelos.....	87
4.	Evaluación de la vulnerabilidad de los suelos ante la acción del glifosato 90	
4.1.	Escenario 1: Continuidad en la aplicación de glifosato	90
4.2.	Escenario 2: Aplicación de glifosato hasta cierto tiempo	92
VIII.	CONCLUSIONES	95

IX.	BIBLIOGRAFÍA.....	97
X.	ANEXOS	109
1.	Determinación de glifosato en laboratorio	109
2.	Registro fotográfico.....	114

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Métodos de laboratorio usados para la determinación de las características de los suelos.....	45
Tabla 2. Distribución de mallas usadas para el análisis granulométrico.....	46
Tabla 3. Dimensiones de las columnas utilizadas en el modelo de infiltración.	63
Tabla 4. Escenarios de simulación ejecutados.	64
Tabla 5. Criterios para la evaluación del RMSE.....	65
Tabla 6. Resumen de los parámetros fisicoquímicos determinados en los suelos.	69
Tabla 7. RMSE obtenido por los modelos de poro.	72
Tabla 8. Valores de los parámetros obtenidos de la curva granulométrica.	72
Tabla 9. Parámetros físicos usados para la estimación de las características hidrodinámicas de los suelos.	73
Tabla 10. Valores optimizados de K_s , ψ_d y su error para cada caso.	76
Tabla 11. Valores usados en la discretización espacial y temporal del modelo.	77
Tabla 12. Condiciones iniciales y de frontera utilizadas en cada punto.....	78
Tabla 13. Concentración de glifosato a diferentes profundidades para las columnas de suelo estudiadas.....	84
Tabla 14. Valores del coeficiente de dispersividad.....	87
Tabla 16. Absorbancia y valores de concentración para las concentraciones de glifosato en las pruebas realizadas en C2.	114

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Histéresis en la curva de retención de humedad: a) curva frontera de mojado, b) curva frontera de secado.	33
Figura 2. Curva característica de conductividad en función del contenido de humedad en el suelo.	34
Figura 3. Diferencias finitas.	39
Figura 4. Mallas numéricas estructuradas (a) y no estructuradas (b).	40
Figura 5. Localización de los casos de muestreo en suelos.	42
Figura 6. Localización de puntos de muestreo.	44
Figura 7. Triángulo textural.	47
Figura 8. Discretización del medio.	54
Figura 9. Diagrama del experimento en la columna de suelo: (a) C1 y (b) C2.	63
Figura 10. Texturas encontradas en los puntos de muestreo.	66
Figura 11. Densidad real y aparente de los suelos estudiados.	67
Figura 12. Contenido de humedad en las muestras analizadas.	68
Figura 13. Características químicas analizadas en los suelos.	69
Figura 14. Concentración de glifosato en los suelos estudiados.	70
Figura 15. Curva granulométrica ajustada con los modelos de poro para C1.	71
Figura 16. Curva granulométrica ajustada con los modelos de poro para C2.	72
Figura 17. Lámina infiltrada acumulada de C1.	74
Figura 18. Lámina infiltrada acumulada de C2.	74
Figura 19. Ajuste de parámetros para la ecuación de Richards en C1.	76
Figura 20. Ajuste de parámetros para la ecuación de Richards en C2.	77
Figura 24. Curva de retención de humedad para los suelos estudiados.	79
Figura 25. Curva de conductividad hidráulica para los suelos estudiados.	80
Figura 26. Curva de conductividad hidráulica en función de la presión de succión para los suelos estudiados.	80
Figura 27. Curvas de capacidad específica del suelo en función de la presión de succión.	81
Figura 25. Perfil de humedad del suelo para C1.	83
Figura 27. Perfil de humedad del suelo para C2.	83
Figura 27. Concentración de glifosato vs. profundidad en C1.	85
Figura 28. Concentración de glifosato vs. profundidad en C2.	86
Figura 29. Concentración de lixiviado en el tiempo para C2.	86
Figura 30. Concentración de glifosato en el perfil del suelo C1: (a) concentración optimizada y (b) comportamiento de la concentración en la prueba a lo largo del tiempo.	88
Figura 31. Concentración de glifosato en el perfil del suelo C2. : (a) concentración optimizada y (b) comportamiento de la concentración en la prueba a lo largo del tiempo.	89
Figura 32. Resultados del escenario 1 para C1.	91
Figura 33. Resultados del escenario 1 para C2.	92
Figura 34. Resultados del escenario 2 para C1.	93

Figura 35. Resultados del escenario 2 para C2.	94
Figura 48. Reporte del cromatógrafo para la concentración inicial del glifosato en C1.....	109
Figura 49. Reporte del cromatógrafo para la concentración de glifosato en el horizonte A del caso 1.	110
Figura 50. Reporte del cromatógrafo para la concentración de glifosato en el horizonte B del caso 1.	111
Figura 51. Reporte del cromatógrafo para la concentración de glifosato en el lixiviado resultante del caso 1.	112
Figura 52. Propuesta de vía de reacción del glifosato con ninhidrina en presencia de molibdato de sodio.....	113

RESUMEN

Desde su desarrollo en los años 70, el glifosato se ha convertido en el pesticida con mayor uso en todo el planeta. Dados los efectos de la lixiviación, el viento y las escorrentías, una parte significativa de este compuesto puede llegar al suelo y/o a los acuíferos y aguas superficiales, afectando generalmente al medio ecológico y la salud humana en general. En este trabajo de investigación se analizó el comportamiento de dos suelos agrícolas, uno de textura arcillo limosa (C1) y uno de textura franco limosa (C2), ante la acción del glifosato. Para ello se diseñó un modelo a escala en laboratorio que representó el comportamiento del suelo contaminado con este compuesto, a través de pruebas de infiltración y distintas condiciones de aplicación de la solución de glifosato. Mediante la solución numérica con diferencias finitas de la ecuación de Richards, y a partir de las curvas de retención de humedad y de conductividad hidráulica, se modeló la transferencia de agua en el suelo y de este modo se resolvió la ecuación de advección – dispersión. Mediante la solución del problema inverso, se obtuvo el coeficiente de dispersión del glifosato en los dos casos de estudio, necesario para una representación correcta del transporte de este soluto en el suelo. Los resultados mostraron que C1 logró retener en gran medida el glifosato, mientras que C2 resultó ser más vulnerable, ya que liberó con mayor facilidad el contaminante y presentó mayores concentraciones en el perfil. El modelo utilizado representó bien las condiciones dadas en la prueba realizada, por lo que se evaluaron escenarios de simulación, que permitieron predecir el destino de dicho herbicida en los distintos suelos, lo que funciona como herramienta para que las autoridades competentes gestionen y controlen la contaminación.

Palabras Clave: Modelación numérica, suelos agrícolas, contaminación, glifosato, pesticidas.

ABSTRACT

Since its development in the 1970s, glyphosate has become the most widely used pesticide on the planet. Given the effects of leaching, wind and runoff, a significant part of this compound can reach the soil and/or aquifers and surface waters, generally affecting the ecological environment and human health in general. In this research work, the behavior of two agricultural soils, one with a silty clay texture (C1) and one with a silty loam texture (C2), was analyzed under the action of glyphosate. To this end, a laboratory scale model was designed that represented the behavior of soil contaminated with this compound, through infiltration tests and different conditions of application of the glyphosate solution. Using a numerical solution with finite differences of the Richards equation and using the moisture retention and hydraulic conductivity curves, the water transfer in the soil was modelled and thus the advection-dispersion equation was solved. By solving the inverse problem, the dispersion coefficient of glyphosate was obtained in the two case studies, which is necessary for a correct representation of the transport of this solute in the soil. The results showed that C1 was able to retain glyphosate to a large extent, while C2 was more vulnerable, as it released the contaminant more easily and presented higher concentrations in the profile. The model used represented the conditions given in the test carried out well, so simulation scenarios were evaluated, which allowed the prediction of the fate of said herbicide in the different soils, which works as a tool for the competent authorities to manage and control contamination.

Keywords: Numerical modeling, agricultural soils, pollution, glyphosate, pesticides

I. INTRODUCCIÓN

La contaminación del suelo se vincula directamente con el deterioro de los cuerpos de agua subterránea, provocada por la liberación de contaminantes, que atraviesan la zona vadosa hasta llegar al acuífero subyacente (Rodrigo-Illarri et al., 2020). Las actividades agrícolas se destacan entre las fuentes de contaminación difusa más relevantes dado el intensivo uso de pesticidas para el control de las plagas en los cultivos. Estas fuentes representan un riesgo significativo, ya que pueden afectar el suministro de agua para consumo humano y perjudicar los ecosistemas acuáticos en las zonas de descarga, debido en gran medida a la toxicidad de los contaminantes implicados (Kern et al., 2020).

La utilización intensiva de pesticidas en la agricultura ha crecido considerablemente con el objetivo de controlar las plagas y garantizar el rendimiento y la calidad de los cultivos (da Silva et al., 2022). El suelo actúa como el principal receptor de estos químicos, y su destino en el ambiente depende de las interacciones fisicoquímicas entre los componentes del suelo y el contaminante o compuesto aplicado (Martínez-Escudero et al., 2023). Estas interacciones determinan el grado de sorción y desorción del pesticida en el suelo, lo que influye en su disponibilidad tanto para el control de malezas como en su impacto ambiental. Cuando la sorción es baja, mayor cuantía del pesticida permanece en la solución del suelo, lo que facilita su absorción por las semillas de malezas, mejorando así su control (Bernasconi et al., 2021; Kafaei et al., 2020).

Existen varios métodos para clasificar los pesticidas, una de las formas generales es sobre la base de las plagas que controlan como: herbicidas, insecticidas, fungicidas, rodenticidas y nematicidas (Abubakar et al., 2019). En general, las consecuencias ambientales que los acompañan se deben principalmente a las cualidades persistentes y generalizadas de éstos, que han causado estragos en la biodiversidad (Zhou et al., 2012). El glifosato [N-(fosfonometil)glicina] actúa como agente sistémico no selectivo de post-emergencia, a menudo rociado sobre hojas de malas hierbas no deseadas para el control del crecimiento; es decir, se encuentra dentro del grupo de los

herbicidas. Se ha comprobado que una parte significativa de este compuesto puede llegar al suelo y a las aguas, impactando negativamente a los ecosistemas y transportándose a través de la cadena trófica (G. Sun et al., 2019).

A pesar de que el recurso suelo sirve como almacenamiento de glifosato debido a la alta afinidad que tiene con los agroquímicos, es notable el riesgo que existe en lo relacionado con su contaminación, además de las afectaciones a los recursos hídricos superficiales como arroyos, estuarios y lagos, y a las aguas subterráneas; especialmente porque las pequeñas concentraciones de este contaminante que se acumulan pueden ser amplificadas por la cadena alimentaria y penetrar en especies de animales hasta llegar al ser humano, convirtiéndose no sólo en un problema para el medio ambiente sino para la salud humana (Rasool et al., 2022; Soares et al., 2019).

En México, el glifosato se encuentra como ingrediente activo en una amplia gama de herbicidas comerciales y se utiliza principalmente en cultivos de soya, trigo, algodón y maíz (Alcántara-de la Cruz et al., 2021). La FAO (Organización de las Naciones unidas para la Alimentación y la Agricultura) reportó que entre 2009 y 2010 en el país se aplicaron 4.55 toneladas de pesticidas aproximadamente por cada 1,000 hectáreas; el panorama no mejoró en 2013, año en el que se emplearon 31,195 toneladas de herbicidas (Bejarano-González, 2017). Actualmente, los productores y autoridades mexicanas se encuentran atravesando diversos procedimientos legales debido al alto impacto de este compuesto en los ecosistemas y la salud pública. Aunado al uso de plaguicidas cancerígenos como diclorodifeniltricloroetanos (DDT), lindano, heptacloro, endosulfán, aldrín, endrín, dieldrín (organoclorados), con altos impactos para la salud humana y el ambiente (Rodriguez G & Araujo Leon, 2018).

A la fecha, los estudios relacionados con la resistencia que poseen varias especies de plantas a la acción de dicho herbicida son más abundantes que aquellos en los que se investiga el comportamiento y las rutas de este tipo de contaminantes en el medio ambiente a través de la utilización de herramientas numéricas (Alcántara de la Cruz et al., 2016; Palma-Bautista et al., 2019), por lo que es primordial ejecutar con estudios de riesgo respecto al manejo, transporte

y almacenamiento del glifosato en el suelo, para así contar con una herramienta que permita predecir su destino, especialmente en suelos de condiciones texturales diferentes.

Se ha demostrado que las herramientas de modelación numérica son útiles para complementar y profundizar el análisis de la dinámica de los contaminantes en el suelo. Por ejemplo, Lei et al. (2018) aplicaron el modelo de van Genuchten para estimar las propiedades hidráulicas y uno unidimensional de transporte de solutos bajo condiciones de flujo de agua continuo y saturado controlado por una bomba peristáltica en suelos de China. Por su parte, Dusek et al. (2015) utilizaron un modelo numérico 1-D basado en la ecuación de Richards para resolver el flujo de agua y la ecuación de advección-dispersión para simular el movimiento y transporte de solutos, creando escenarios a partir del modelo calibrado. En el estudio realizado por Villarreal et al. (2020) se empleó el código HYDRUS 1-D para predecir la dinámica del glifosato y el AMPA (Ácido Aminometilfosfónico), su principal producto de degradación, considerando propiedades hidráulicas tanto constantes como variables durante el ciclo de cultivo analizado.

De este modo, es posible observar que en el estudio del transporte y distribución del glifosato en el suelo se ha registrado, por un lado, el análisis del contaminante en suelos con diferentes características o bajo distintas condiciones de cultivo, o bien sea, el uso de modelación numérica para estudiar más a fondo el comportamiento del compuesto en una columna de un tipo de suelo. Por lo tanto, el presente trabajo de investigación analizó el movimiento y destino del glifosato en dos tipos de suelos agrícolas a través de experimentación y modelación numérica; un suelo con textura arcillo limosa del valle medio del Sinú en Montería, Córdoba, Colombia y otro con textura franco limosa del valle del río San Juan, municipio de San Juan del Río, Querétaro, México. Para ello se llevaron a cabo experimentos en donde se aplicó una solución de glifosato en cada suelo y se utilizó un modelo numérico unidimensional basado en la ecuación de Richards para la resolución de la curva de conductividad hidráulica y la curva de retención de humedad y, la ecuación de advección-dispersión para el transporte del contaminante en el perfil; ésto con el fin de examinar la vulnerabilidad de cada tipo de suelo ante la acción del contaminante.

II. OBJETIVOS

1. Objetivo General:

Modelar la transferencia de agua y el transporte del glifosato en dos texturas de suelo distintas, mediante la solución por diferencias finitas de las ecuaciones de Richards y advección-dispersión.

2. Objetivos Específicos:

- Evaluar las características fisicoquímicas de los suelos.
- Determinar las características hidrodinámicas del suelo: curva de retención de humedad y curva de conductividad hidráulica
- Estimar el coeficiente de dispersividad del glifosato en los distintos suelos agrícolas.
- Evaluar la vulnerabilidad de los suelos agrícolas ante la acción del glifosato.

III. HIPÓTESIS

La transferencia de agua y el transporte del glifosato en el suelo, se pueden describir acoplando numéricamente la ecuación de Richards a la ecuación de advección-dispersión, comparando dos texturas de suelos distintas, para conocer la vulnerabilidad y el riesgo de contaminación del suelo por glifosato.

IV. ANTECEDENTES

1. Comportamiento de los pesticidas en el suelo

Villholth et al. (2000) investigaron el transporte facilitado por partículas de un pesticida absorbente (procloraz, N-propil-N-[2-(2,4,6-triclorofenoxi)etil]imidazol-1-carboxamida) en una parcela de campo de 5 x 5 m con drenaje subterráneo en un suelo franco arenoso en Dinamarca. Después de la aplicación del pesticida, monitorearon tres eventos de lluvia simulados durante un período de ocho días en términos de caudal de drenaje, contenido de material particulado (>0.24 μm) y concentración de pesticidas en la solución y en las fases particuladas en el agua de drenaje. Encontraron que la fracción de pérdida de pesticidas en el drenaje fue del 0.2 % de la masa aplicada, de la cual el 6 % se asoció con la fase particulada. Los autores indican que las vías de flujo macroporosas parecieron ser las principales rutas de transporte de pesticidas y partículas, suponiendo que la sorción preferencial de partículas en el agua de drenaje en relación con el suelo, y posiblemente también la desorción lenta de las partículas, influyeron en la lixiviación de pesticidas.

En el estudio del comportamiento de pesticidas y sus propiedades bioquímicas en los suelos cultivados con arroz en China, Zhou et al. (2012) observaron que la población y la actividad de los organismos metanógenos se incrementaron ligeramente con la adición de carbofurano o butacloro en el suelo, sin embargo, esta actividad se inhibió de manera significativa al añadir butacloro (10 mg/kg), carbofurano (0.5 mg/kg) y carbendazim (10 mg/kg). Al séptimo día de la prueba, la inhibición alcanzó el máximo y luego se redujo gradualmente hasta el nivel de control. Estimaron que 1 mg/kg de carbofurano y butaclor estimulan notablemente la actividad metabólica y la reproducción de las bacterias metanógenas, antinitrificantes, fijadoras de nitrógeno y las reductoras de sulfato del suelo. Adicionalmente, notaron que las concentraciones más altas de carbofurano y butacloro influyen significativamente en la inhibición de las colonias y la actividad bacteriana.

De manera similar, Sun et al. (2019) exploraron cómo las variables ambientales y los niveles de contaminación por pesticidas organoclorados (POC) influyen en

las estructuras de las comunidades bacterianas en un sitio de planta de insecticidas abandonado en China. En su estudio, identificaron un total de 28 filos bacterianos en suelos con diversas propiedades fisicoquímicas y concentraciones de POC. La diversidad microbiana general, medida en términos de diversidad filogenética y riqueza de filotipos, mostró correlaciones con las concentraciones de hexaclorociclohexanos (HCH) y DDT en los suelos, así como con otras características del suelo, incluyendo el nitrógeno total, el carbono orgánico disuelto, el pH y la vegetación. Observaron que la diversidad microbiana del suelo estaba significativamente influenciada por la vegetación, la cual explicó el 31.8 % de la variación total, seguida por el nivel de POC (28.3 %), nitrógeno total (12.4 %), carbono orgánico disuelto (63 %) y pH (24 %).

Asimismo, da Silva et al. (2022) examinaron la dinámica de la hexazinona en tres tipos de suelos agrícolas brasileños con texturas distintas: Arenosol (arenoso franco), Cambisol (arcillo arenoso) y Ferrasol (franco arenoso), provenientes de zonas sin previa aplicación de herbicidas. Las constantes de sorción (K_{fs}) y desorción (K_{fd}) de la hexazinona variaron según la textura de los suelos. El Ferrasol presentó la mayor constante de sorción, con un valor K_{fs} de 0.46 mg/kg, seguido por el Arenosol (0.39 mg/kg) y Cambisol (0.16 mg/kg), cuyo comportamiento de desorción siguió el mismo patrón. El Cambisol mostró un mayor potencial de lixiviación, resultando con un índice de vulnerabilidad del acuífero (GUS, por sus siglas en inglés) de 3.9, si se le compara con el Arenosol y Ferrasol, que presentaron índices GUS de 3.6 y 3.2, respectivamente. Se concluyó que la capacidad de intercambio catiónico (CIC) y el pH del suelo resultaron ser las propiedades que mayormente influyeron en la sorción y desorción de la hexazinona en el medio.

Bernasconi et al. (2021) ejecutaron una investigación que analizó las caracterizaciones espaciotemporales de plaguicidas en suelos, con el fin de investigar cómo un sistema de agricultura basado en prácticas agroecológicas (ABA, por sus siglas en inglés) puede verse afectado por las áreas circundantes que emplean sistemas de producción agrícola química (CBA, por sus siglas en inglés). En el análisis de las muestras, se examinaron 19 herbicidas (incluyendo tres metabolitos) y tres fungicidas, encontrando la presencia de glifosato y

AMPA, además de 2,4-D, atrazina, metsulfuron-metil, acetoclor, desetil-atrazina, tebuconazol y epoxiconazol. En el 93 % de las muestras de CBA y en el 32 % de las ABA se detectaron tres o más pesticidas. Tanto el glifosato y como el AMPA, que resultaron con la frecuencia de detección más alta, también aportaron el 90 % de la carga total de plaguicidas en CBA y ABA. Las concentraciones máximas en los campos CBA/ABA, respectivamente, fueron: glifosato (1268.92/98.93 µg/kg), AMPA (2919.17/114.01 µg/kg), seguido de 2,4-D (38.52/31.12 µg/kg) y epoxiconazol (13.35/18.41 µg/kg). No evidenciaron diferencias significativas temporales en los niveles de glifosato en cada establecimiento, lo que respalda su pseudo-persistencia en campos CBA y su establecimiento en sistemas ABA. Las concentraciones de glifosato y AMPA se encuentran en niveles que previamente se ha indicado que pueden causar efectos letales y subletales en los organismos del suelo.

La relación entre los pesticidas en el suelo y su llegada a los acuíferos fue estudiada por Hintze et al. (2024), que investigaron si el suelo a largo plazo puede actuar como una fuente de metabolitos en las aguas subterráneas; para ello analizaron en campos agrícolas suizos el herbicida cloridazón (CLZ) y sus metabolitos detectados con frecuencia desfenil-cloridazón (DPC) y metil-desfenil-cloridazón (MDPC). Para suelos donde la última aplicación de CLZ fue hace 5 a 10 años, hallaron concentraciones de metabolitos 10 veces (DPC: 0.22 – 7.4 µg/kg) y 6 veces (MDPC: 0.12 – 3.1 µg/kg) más altas en comparación con CLZ (< 0.050 – 1.0 µg/kg). Los cálculos sugirieron que la mayoría de los metabolitos (DPC: 63 – 96 %, MDPC: 74 – 97 %) fueron absorbidos a pesar de su menor tendencia a la sorción. Encontraron que las concentraciones de estos compuestos en el agua intersticial del suelo fueron más altas en la parte más profunda del perfil (75 – 100 cm) con valores medianos de 3.6 y 1.7 µg/L para DPC y MDPC, respectivamente; mientras que los niveles de los metabolitos en las aguas subterráneas fueron de 3 a 3.5 veces más altas en los pozos de monitoreo ubicados aguas abajo de la zona agrícola que aguas arriba de la misma. Las simulaciones de modelos numéricos de flujo y transporte sugirieron que este aporte al suelo y a la zona no saturada puede causar concentraciones elevadas de metabolitos (> 0.1 µg/L) en las aguas subterráneas durante más de

una década. Este aumento resalta el potencial del suelo como una fuente de metabolitos a largo plazo después de la interrupción de la aplicación de pesticidas.

2. Modelación del transporte de contaminantes en el suelo

El empleo de modelos numéricos para investigar el transporte de contaminantes en suelos ha sido objeto de numerosas investigaciones. Por ejemplo, Mousavi Nezhad et al. (2011) crearon e implementaron un modelo numérico que simula el transporte de contaminantes teniendo en cuenta tanto la macroheterogeneidad (variabilidad espacial en las propiedades macroscópicas) como la microheterogeneidad (distribución espacial de los macroporos) del suelo. Para lograr esto, emplearon un enfoque de elementos finitos estocásticos, lo que les permitió integrar los efectos de la variabilidad espacial de las características hidrodinámicas del suelo, como la conductividad hidráulica, permeabilidad y la retención de humedad, en el comportamiento de los contaminantes.

Ejecutaron la simulación del transporte de soluto no reactivo en un lisímetro usando condiciones de flujo de agua en estado estacionario, teniendo en cuenta la transferencia del soluto entre los dominios de macro y microheterogeneidad. Evaluaron cuatro escenarios distintos relacionados con la estructura y formación del suelo: un dominio único con propiedades hidráulicas constantes o uniformes (SDU), un sistema de doble dominio con propiedades hidráulicas constantes (DDU), un dominio único con propiedades hidráulicas variables (SDV) y un sistema de doble dominio con propiedades hidráulicas variables en el espacio (DDV). Los resultados indicaron que la combinación del enfoque de dominio dual con el método estocástico mejora las predicciones numéricas, haciendo que el modelo se ajuste mejor a la realidad observada.

Murcia Fandiño et al. (2020) analizaron la propagación de lixiviados de residuos sólidos urbanos (RSU) en suelos saturados derivados del relleno sanitario Jacarezinho en Brasil. Para ello, desarrollaron un modelo fundamentado en datos disponibles sobre geología, hidrología, hidrogeología y caracterización de lixiviados. Además, utilizaron programas como MODFLOW y MT3DMS para

simular la dispersión de metales como el cromo, cobre, plomo y zinc. Calcularon a 1, 5, 10, 25 y 50 años los campos de concentración de masas de contaminantes. Sus resultados indican que los contaminantes podrían llegar al río Ouro Grande, en un período de 5 años y a un afluyente cercano al relleno sanitario en un período de 1 año de la generación inicial de lixiviados. Para el período final de la simulación, el afluyente del río Ouro Grande recibió concentraciones de cobre y plomo que excedieron los valores máximos permitidos por la legislación brasileña para el estándar de calidad ambiental de los cuerpos de agua.

Aunque muchos estudios abordan el transporte de contaminantes en medios porosos completamente saturados, la situación es diferente para suelos parcialmente saturados. Por ello, Viccione et al. (2020) resolvieron numéricamente las ecuaciones que regulan el destino y los procesos de transporte en suelos parcialmente saturados mediante el método de elementos finitos. Emplearon la ecuación de Richards para modelar la dinámica del flujo a través del coeficiente de conductividad hidráulica K_s , mientras que el destino de los contaminantes se describió principalmente mediante el coeficiente de sorción K_{fs} . Analizaron un derrame local y continuo de contaminantes, como el benceno y el tetracloroetileno en un terreno superior de espesor variable, considerando distintos escenarios de precipitación. Los resultados mostraron que las variaciones en los escenarios de lluvia no impactaron significativamente las concentraciones, probablemente porque la función escalonada utilizada no refleja adecuadamente eventos extremos de infiltración, que son cruciales para la migración de contaminantes.

Xue et al. (2023) desarrollaron un modelo numérico 3-D de transporte de solutos en medio saturado, variables del suelo y aguas subterráneas para comprender los riesgos de contaminación en un sitio de fundición de plomo y zinc en el sur de China. Utilizando el modelo numérico calibrado, predijeron las tendencias de riesgo de contaminación por metales pesados y propusieron el diseño y la evaluación de una tecnología de control de la contaminación. Los resultados mostraron que el riesgo de derrame de metales pesados es extremadamente alto, pudiendo atravesar el límite geográfico del sitio después de 60 días y afectar

el río más cercano en el día 712. Los escenarios de simulación les permitieron identificar que mediante el uso de una barrera reactiva permeable (PRB, por sus siglas en inglés) basada en hierro de valencia cero (ZVI) y bentonita, el tiempo para que la columna de contaminación de Cd llegue al río cercano podría retrasarse efectivamente en 225 días, y su rango de difusión se reduciría al 10.2 %. Los autores concluyen que una mejor estrategia de remediación para el sitio es primero eliminar, pasivar o solidificar las fuentes de contaminación existentes y luego usar la tecnología PRB para bloquear las vías de transmisión de la contaminación.

Hmimou et al. (2014) llevaron a cabo una investigación sobre el transporte del pesticida carbofurano a nivel de campo, el cual es conocido por su alta movilidad, especialmente en suelos arenosos con una elevada conductividad hidráulica y baja materia orgánica, característicos de la región de Mnasra en Marruecos. Los autores desarrollaron un modelo numérico mecanicista que facilitó la simulación del movimiento de agua y solutos (bromuro y carbofurano) en el suelo. Para describir la curva de retención de humedad, emplearon la ecuación de Van Genuchten (1980), y utilizaron el modelo de Brooks y Corey para la conductividad hidráulica K , lo que les permitió resolver unidimensionalmente la ecuación de Richards. Posteriormente, aplicaron la ecuación de advección-difusión en su versión unidimensional para el modelo de transporte. Los resultados calculados coincidieron con los valores medidos, encontrando que, a pesar de un régimen de riego y precipitaciones limitadas, el carbofurano se lixivió casi por completo más allá de la zona radicular. Las simulaciones futuras indicaron que, con un régimen de riego más intensivo, el carbofurano podría alcanzar una profundidad de 100 cm, mientras que con un régimen de riego deficiente no superaría los 60 cm.

Por su parte, Dusek et al. (2015) Dusek et al. (2015) llevaron a cabo un estudio sobre el transporte de bromuro y cinco pesticidas (atrazina, imazaquin, sulfometuron metil, S-metolaclor e imidacloprid) a través de una columna de suelo oxisol tropical no perturbada en Hawái, Estados Unidos, empleando un modelo numérico unidimensional. Este modelo se construyó utilizando la ecuación de Richards 1-D para describir el flujo de agua y la ecuación de

advección-dispersión para el transporte de solutos. Los datos del experimento de lixiviación en columna fueron utilizados para realizar un análisis de incertidumbre, aplicando una metodología de optimización global que permitió evaluar la sensibilidad del modelo a los parámetros de transporte. Los resultados mostraron que todos los plaguicidas presentaban una alta movilidad, con coeficientes de sorción menores a $2 \text{ cm}^3/\text{g}$.

Los resultados experimentales revelaron un comportamiento notablemente no conservativo del trazador de bromuro. En cuanto a los pesticidas, se observó que, salvo el imidacloprid, eran menos persistentes. Tres de ellos (atrazina, sulfometuron metil y S-metolaclor) fueron representados de manera más precisa mediante un modelo de sorción cinética lineal, mientras que las curvas de ruptura de imazaquin e imidacloprid se ajustaron mejor utilizando un enfoque de sorción instantánea no lineal. El análisis de sensibilidad destacó que el parámetro más influyente en el modelo era el coeficiente de distribución de sorción. Además, la mayoría de los puntos experimentales de las curvas de avance se encontraban dentro de los límites de predicción, lo que respalda la adecuación del concepto y la estructura del modelo para describir los procesos de transporte en la columna de suelo estudiada.

También, Márquez et al. (2017) ejecutaron un estudio sobre el transporte de pesticidas en suelos empleando el software HYDRUS 1D para modelar la distribución vertical de un nematicida (DiTera) en suelos homogéneos. Los parámetros hidráulicos del suelo se determinaron mediante experimentos de laboratorio, mientras que el coeficiente de dispersividad fue estimado utilizando un enfoque de ajuste inverso basado en datos experimentales y simulados. Los resultados de laboratorio indicaron una distribución vertical del nematicida sin variaciones significativas, observándose una mayor concentración en la superficie que disminuía progresivamente con la profundidad. El modelo predictivo logró representar con precisión el comportamiento del nematicida en condiciones controladas, alcanzando un R^2 (coeficiente de determinación) de 0.97 y un error cuadrático medio (RMSE) de 67.41 mg/L.

Diamantopoulos et al. (2017) investigaron si los resultados generados por el modelo avanzado HYDRUS (2D/3D) son comparables con los obtenidos por los modelos unidimensionales PEARL y PELMO, comúnmente utilizados en el registro de pesticidas. Para ello, emplearon un análisis comparativo de modelos, con el fin de explorar la incertidumbre conceptual asociada con la representación de los procesos físicos del suelo en el transporte de pesticidas bajo diferentes condiciones. Las simulaciones abarcaron el movimiento del agua en el suelo, así como el transporte de pesticidas y calor, considerando cuatro tipos de pesticidas hipotéticos y nueve escenarios pedoclimáticos estándar en Europa.

Los resultados de Diamantopoulos et al. (2017) mostraron que la cantidad estimada de pesticidas lixiviados a más de 1 m de profundidad, considerando todas las sustancias, ubicaciones y años simulados, se mantenía en un rango comparable entre los tres modelos evaluados. Asimismo, las concentraciones anuales de pesticidas correspondientes al percentil 80 a esa misma profundidad no presentaron diferencias estadísticamente significativas entre los modelos. Con base en estos hallazgos, los autores concluyeron que HYDRUS (2D/3D) puede ser una alternativa viable para la evaluación de contaminantes, ya que sus resultados son consistentes con los obtenidos por PEARL y PELMO, con la ventaja adicional de permitir simulaciones en dos y tres dimensiones.

Lei et al. (2018) investigaron el comportamiento de transporte del 3,5,6-tricloro-2-piridinol (TCP), uno de los productos de degradación de pesticidas más destacados, mediante experimentos y simulaciones en tipos representativos de suelos agrícolas. El estudio incluyó parcelas de arroz, canola y hortalizas. Evaluaron las propiedades físicas del suelo y las curvas características de retención de humedad para determinar parámetros hidrodinámicos faltantes, además de analizar la estructura porosa del suelo. Experimentos por lotes se llevaron a cabo para calcular el coeficiente de adsorción del TCP, mientras que curvas de avance del trazador conservativo Br⁻ (bromo) en columnas de suelo intactas permitieron estudiar la dinámica del transporte del TCP. Para modelar las propiedades hidráulicas, como la curva de retención de humedad, emplearon el modelo de van Genuchten (1980) junto con un modelo unidimensional de transporte de solutos.

Los parámetros necesarios para modelar el transporte de solutos en dos regiones distintas se obtuvieron resolviendo un problema inverso, utilizando condiciones de flujo continuo de agua controladas mediante una bomba peristáltica bajo una condición de frontera tipo Neumann. Los resultados mostraron que el transporte de TCP en el suelo sigue patrones complejos, influenciados significativamente por desequilibrios químicos y físicos. Además, se identificó un mayor riesgo de contaminación en los cuerpos de agua aledaños a los campos de arroz y canola, debido a un flujo preferencial más pronunciado y una conectividad de poros más eficiente, a pesar de que los suelos de las parcelas de hortalizas presentaban mayor macroporosidad. Estos hallazgos ofrecen información clave y un enfoque de modelado útil para evaluar el riesgo de lixiviación de pesticidas hacia los acuíferos.

Por otro lado, Padilla y Selim (2018) realizaron estudios de sorción en lotes junto con experimentos de desplazamiento miscible para analizar la movilidad del glifosato en dos tipos de suelos agrícolas, uno de textura franco limosa y otro de textura arcillosa. Los resultados reportados por los autores en los ensayos por lotes revelaron una alta afinidad de ambos suelos por el glifosato solvatado, siendo esta afinidad más pronunciada en el suelo arcilloso. En el caso del suelo franco limoso, la sorción del glifosato podría estar influenciada por la presencia de óxidos amorfos de hierro y aluminio, mientras que, en el suelo arcilloso, su elevada capacidad de intercambio catiónico probablemente facilita la reacción de complejación del glifosato con cationes polivalentes presentes en la superficie.

Los estudios de desplazamiento miscible revelaron que la movilidad del glifosato es extremadamente limitada en ambos suelos, con solo el 3 % y el 2 % de la masa del herbicida aplicado recuperada en los efluentes de los suelos franco limoso y arcilloso, respectivamente. La dinámica del transporte del glifosato en ambos suelos fue modelada con precisión utilizando un enfoque de reacción múltiple de dos sitios, el cual mostró un mejor desempeño en comparación con el modelo lineal CXTFIT (Toride y Leij, 1995) desarrollado por el USDA. Además, el análisis de los residuos de herbicidas extraídos indicó que, aunque tanto el

glifosato como su metabolito AMPA presentan una fuerte retención en los suelos, el AMPA muestra una movilidad relativamente mayor en ambos casos.

También, Villarreal et al. (2020) llevaron a cabo un estudio comparativo entre los contenidos medidos y predichos de glifosato y AMPA en suelos manejados bajo labranza cero y labranza convencional. Analizaron las predicciones utilizando propiedades hidráulicas constantes y variables en el tiempo, además de evaluar la capacidad del modelo para estimar la acumulación de ambos compuestos durante la etapa de cultivo. Para ello, emplearon el software HYDRUS 1-D, lo que permitió modelar la dinámica del glifosato y AMPA considerando diferentes condiciones hidráulicas a lo largo del ciclo agrícola. Los resultados mostraron que el modelo logró predecir de manera satisfactoria la distribución de los contaminantes en el perfil del suelo, con un RMSE de 1.93, lo cual refleja un ajuste adecuado entre las mediciones y las simulaciones.

El modelo HYDRUS 1-D subestimó el proceso de acumulación de glifosato y AMPA en el suelo durante el ciclo de cultivo en comparación con los datos observados en el campo. Las simulaciones mostraron que los valores más altos de la conductividad hidráulica saturada incrementan el riesgo de transporte vertical de ambos compuestos. Además, al incorporar la variabilidad temporal de las propiedades hidráulicas en la simulación, no se observó una mejora significativa en el rendimiento del modelo, lo que sugiere que este es más sensible a los parámetros relacionados con los solutos.

Ona (2022), utilizó el modelo numérico HYDRUS 1D para analizar el transporte de pesticidas en columnas de suelo alteradas e inalteradas. Los experimentos de degradación de pesticidas realizados por el autor, revelaron una disminución rápida de las cargas lixiviadas con el tiempo. Para explicar los diferentes patrones de lixiviación observados en los suelos, el autor propuso cinco procesos fisicoquímicos: (1) la extensión relativa del flujo preferencial, (2) la capacidad de sorción de los compuestos en distintos tipos de suelo, (3) el grado de degradación de los contaminantes en el suelo, (4) las variaciones en la cinética de sorción asociadas con la difusión de los pesticidas en los agregados del suelo,

y (5) la protección de los compuestos debido a una combinación de difusión en los agregados y la existencia de rutas de flujo preferenciales.

V. MARCO TEÓRICO

1. Modelación numérica

La modelación numérica es entendida como una aproximación simplificada de la realidad mediante un modelo conceptual. Este proceso implica formular hipótesis que permitan representar de manera adecuada un sistema natural. Los modelos conceptuales se crean mediante la programación de ecuaciones que describen el comportamiento de fenómenos específicos, permitiendo que un ordenador realice los cálculos correspondientes. Es necesario ajustar dichos modelos para que reflejen las condiciones del entorno que se desea simular, y posteriormente, deben ser calibrados y validados de forma adecuada (MADS, 2018).

Según lo establecido por Refsgaard y Henriksen (2004), la modelación implica la interacción de cuatro componentes fundamentales: la realidad, que corresponde al sistema natural o área de estudio; el modelo conceptual, que representa los procesos físicos, químicos y biológicos mediante ecuaciones, relaciones constitutivas, abstracciones verbales o leyes naturales, con el fin de simular el sistema natural; este modelo conceptual se convierte en fórmulas lógico-matemáticas dentro de un programa o código computacional, denominado código del modelo; y el modelo en sí, que es la adaptación del código para ajustarse al entorno que se desea simular (Refsgaard y Henriksen, 2004).

2. Movimiento del agua en el suelo

Las ecuaciones que representan el desplazamiento del agua se derivan de la aplicación de los principios de conservación de masa y cantidad de movimiento. La dinámica del agua en el medio poroso es bien descrita por la ley de Darcy (Jiang y Qiu, 2022), en términos matemáticos se escribe de la siguiente manera:

$$q = -K\nabla H \quad (5.1)$$

donde K es la conductividad hidráulica y ∇H representa el gradiente hidráulico.

La ley de Darcy fue formulada originalmente para medios saturados, pero posteriormente se ha extendido al estudio en medios no saturados. En estos últimos, la conductividad hidráulica no solo depende de las coordenadas

espaciales, sino también del contenido de humedad o de la presión de succión del agua (Fuentes et al., 2004). La ecuación general de transferencia de agua en un medio poroso considerando la densidad del agua constante, es la siguiente:

$$\nabla \cdot [K\nabla H] + w = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (5.2)$$

donde w representa el término de fuente o sumidero, θ la humedad del suelo, y t el tiempo (Fuentes y Rendón, 2012).

3. La ecuación de Richards

La Ecuación de Richards (1931) describe cómo varía el contenido de agua en función del tiempo y la ubicación. Considerando la curva de retención de humedad, se introduce el concepto de capacidad específica, que se define como la pendiente de esa curva:

$$C(\psi) = \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \quad (5.3)$$

al introducir la capacidad específica (Ecuación (5.3)) en la ecuación de transferencia (Ecuación (5.2)) se obtiene la ecuación de Richards en donde la presión es la variable dependiente:

$$\nabla \cdot [K(\psi)\nabla\psi] + \frac{dK}{d\psi} \frac{\partial \psi}{\partial z} + w = C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (5.4)$$

El primer término del lado izquierdo de la Ecuación (5.4) refleja los efectos de la presión, mientras que el segundo corresponde a los efectos de la gravitación (de León-Mojarro et al., 2007). Para resolver la ecuación de Richards, resulta necesario conocer las propiedades hidrodinámicas del suelo, expresando la conductividad hidráulica (K) y el potencial de presión (ψ) en función del contenido de humedad (θ). Existen varias ecuaciones que representan las características hidrodinámicas, las cuales están descritas por las curvas de conductividad hidráulica y de retención de humedad. Todos buscan describir la relación entre el contenido de agua y el potencial matricial del suelo.

4. Características hidrodinámicas del suelo

Las características hidrodinámicas del suelo se refieren a las propiedades físicas que determinan el movimiento del agua a través de este medio. Estas características se componen de dos relaciones: la primera conecta el contenido de agua con la presión de succión, y se denomina Curva Característica de Humedad o Curva de Retención de Humedad; la segunda describe la conductividad hidráulica (según la ley de Darcy), en función del contenido de humedad o la presión de succión, y se conoce como Curva de Conductividad Hidráulica. Estos aspectos son esenciales en estudios de hidrología, agronomía y en la modelación numérica del transporte de agua y contaminantes en el suelo (Fuentes & Rendón, 2012).

4.1. Curva de Retención de Humedad (CRH)

Describe la relación entre el contenido de agua en el suelo (θ) y el potencial matricial (ψ), que refleja la energía con la que el agua está retenida en los poros; en un medio no saturado ψ varía con respecto a θ , dado que a medida que θ aumenta, la succión disminuye (Reynolds et al., 2023). Esta curva está condicionada por las propiedades texturales y estructurales del suelo; texturas más finas propician una retención de agua mayor para un valor de presión, siendo más gradual la pendiente de la CRH, mientras que efectos capilares predominantes (asociados a la estructura) afectan los valores altos de la presión. Zonas con valores bajos de presión, donde predomina la adsorción, se ven menos afectadas por la estructura que por la textura (Verdi & Naseri, 2024).

La curva característica de humedad presenta una particularidad, en lo relacionado con el tipo de procedimiento que se haya utilizado para su determinación: mojado (sorción) o secado (desorción). Así, la curva de humedecimiento es obtenida a partir de un suelo seco y un valor de ψ lo suficientemente bajo, que va aumentando a medida que se humedece el suelo, en la curva de secado ocurre el efecto contrario, por lo que se parte de un suelo húmedo y se comienza a secar hasta que ψ disminuye; las curvas que se obtienen de cada procedimiento no coinciden, proceso que se denomina histéresis (**Figura 1**) (Schoeneberger & Wysocki, 2005).

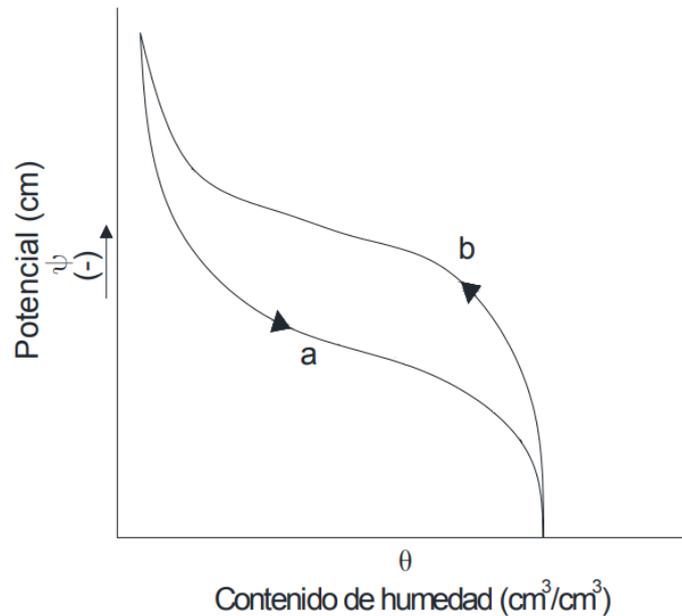


Figura 1. Histéresis en la CRH: a) curva frontera de mojado, b) curva frontera de secado.

Adaptado de Fuentes & Rendón (2012).

Este fenómeno puede atribuirse a la no uniformidad geométrica de los poros, que generalmente poseen forma irregular y están interconectados por pequeños pasajes (Singh & Verdi, 2024). En rango de potenciales altos, este efecto se ve potenciado por texturas gruesas. Un incremento en la histéresis en la CRH, reduce la capacidad relativa de infiltración en el suelo, lo que genera flujos inestables e induce en mayor medida los escurrimientos superficiales y la erosión (Terleev et al., 2016).

4.2. Curva de Conductividad Hidráulica

La conductividad hidráulica se refiere a la capacidad que tiene el suelo para transmitir agua bajo un gradiente hidráulico dado. Depende de la textura, estructura, contenido de humedad y porosidad del suelo. Se clasifica en conductividad hidráulica saturada (K_s), que describe el flujo cuando el suelo está completamente saturado, y conductividad hidráulica no saturada, que determina el flujo en condiciones de menor saturación, donde cambia con el contenido de humedad. La K_s y el θ tienen una notable influencia sobre el drenaje profundo, la escorrentía y la infiltración, por lo que son parámetros fundamentales en el

balance de agua y los modelos de transporte de contaminantes (Zhuang et al., 2021).

Suelos que posean alta conductividad hidráulica son menos propensos a fenómenos erosivos, escurrimientos e inundaciones (Gallage et al., 2013). La determinación de K_s se ha realizado mediante el uso de modelos para la estimación de parámetros que se ajustan a ecuaciones entre las que se destacan las formuladas por Brooks y Corey (1964); van Genuchten (1980) o modelos fractales (Lin & Lee, 2009).

La relación típica entre la conductividad hidráulica y el contenido de humedad se presenta en la **Figura 2**. Al igual que en la CRH, la conductividad hidráulica puede variar a un potencial específico y exhibir histéresis, siendo esta más pronunciada en la relación $K(\theta)$ que en la relación $K(\psi)$ (dos Santos & Esquivel, 2018).

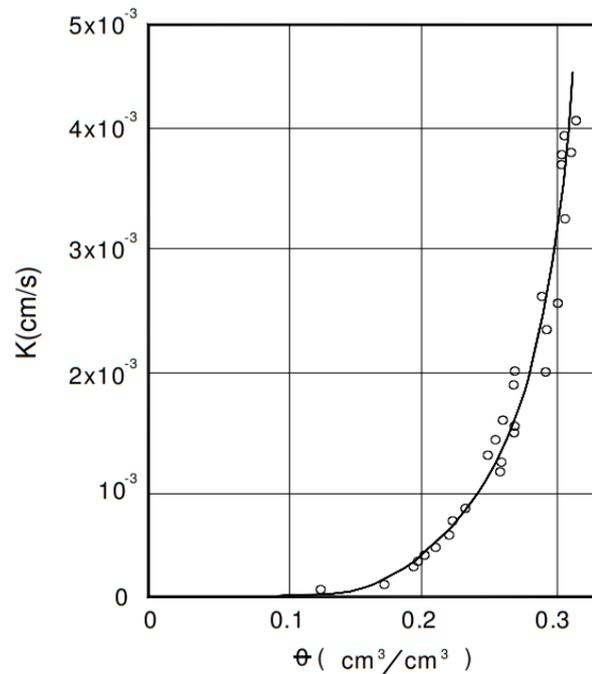


Figura 2. Curva característica de conductividad en función del contenido de humedad en el suelo.

Fuente: Chávez (2010).

5. Métodos de obtención de las características hidrodinámicas del suelo

Existen varios métodos para determinar las características hidrodinámicas del suelo, que van desde los más sencillos, los cuales se basan en propiedades del suelo como la textura, densidad aparente, el contenido de arcilla y la materia orgánica (Lin & Lee, 2009; Malamos et al., 2015a; Todisco et al., 2023), hasta los más avanzados, que demandan de la medición experimental de propiedades hidráulicas mediante equipos especializados como permeámetros, placas de succión o membranas de presión. Para determinar las características hidrodinámicas, se emplean enfoques directos, indirectos y métodos inversos (Anand et al., 2024; Eid et al., 2024).

5.1. Métodos Directos

Los métodos directos hacen referencia a las técnicas de laboratorio y campo que se han desarrollado para determinar las características hidrodinámicas del suelo; éstos incluyen mediciones a partir de tensiómetros y permeámetros (Jougnot et al., 2012). Sin embargo, estos métodos presentan restricciones asociadas a la obtención de un volumen de suelo que sea representativo, lo cual requiere minimizar la variabilidad en las mediciones causada por el flujo preferencial y las condiciones de frontera relacionadas con ciclos de secado y humedecimiento (Alagna et al., 2013; Santos et al., 2021). Por otra parte, técnicas como la tomografía computarizada mediante rayos X se han utilizado para prever propiedades del suelo, incluyendo sus características hidráulicas; la mayor parte de estos métodos poseen un elevado costo de implementación, suelen ser tardados y requerir de gran cantidad de mediciones sobre áreas extensas y períodos largos (Tao et al., 2020).

5.2. Métodos indirectos

Existen diversos enfoques indirectos para determinar los parámetros de las funciones hidráulicas en suelos no saturados, los cuales varían en su complejidad y en las técnicas empleadas para derivar las propiedades hidráulicas del suelo. Entre estos, destacan los métodos basados en la distribución del tamaño de los poros y las funciones de pedotransferencia, que

son frecuentemente utilizados para estimar las curvas de retención de humedad y conductividad hidráulica a través de ecuaciones como las de Brooks y Corey o Van Genuchten, modelos de aprendizaje automático o algoritmos de regresión (Janeau et al., 1999). También se emplean métodos inversos, en los que se ajustan parámetros hidrodinámicos a través de simulaciones computacionales para replicar observaciones experimentales de movimiento de agua o transporte de solutos en el suelo; estos métodos son especialmente útiles cuando las mediciones directas son complejas, costosas o difíciles de realizar (Malamos et al., 2015b).

Las funciones de pedotransferencia (FPT) son herramientas que permiten estimar las propiedades hidrodinámicas del suelo a partir de características físicas y químicas más fácilmente cuantificables, como textura, densidad aparente, materia orgánica y el contenido de carbono (Descroix et al., 2002). Estas funciones son fundamentales en hidrología y ciencias del suelo, ya que las propiedades hidrodinámicas, tales como la CRH y la conductividad hidráulica saturada, son difíciles y costosas de medir directamente en el laboratorio o en el campo. Las FPT se desarrollan mediante modelos estadísticos o de aprendizaje automático que relacionan estas propiedades indirectas con mediciones directas obtenidas de bases de datos de suelos bien caracterizados (Tong et al., 2023). Si bien las FPT simplifican el proceso de parametrización, su precisión depende de la representatividad de los datos utilizados para desarrollarlas y de las condiciones del sitio donde se aplican. Por ello, deben utilizarse con cautela y validarse en contextos específicos para garantizar su fiabilidad (Mohrath et al., 1997).

5.3. Métodos Inversos

La resolución del problema inverso consiste en determinar las causas desconocidas basándose en los efectos que se pueden observar (Alaoui & Helbling, 2006). Este enfoque se emplea para estimar parámetros hidrodinámicos, minimizando las diferencias entre las observaciones y las predicciones del flujo mediante el método de suma de cuadrados. Los métodos inversos ofrecen varias ventajas: 1) permiten calcular parámetros que optimizan

el ajuste entre los datos simulados y medidos, 2) posibilitan la cuantificación de los límites de confianza en lo relacionado tanto con los parámetros como con las predicciones, 3) proporcionan un diagnóstico estadístico que evalúa la calibración y los datos, y 4) no se limitan a condiciones iniciales o de frontera específicas, ni a las relaciones constitutivas o el tratamiento de heterogeneidades (De Souza et al., 2008).

6. Modelación de transporte de contaminantes

Los modelos de transporte de contaminantes buscan simular las variaciones en la concentración de compuestos a medida que se desplazan a través del ambiente. Un contaminante que entra al entorno puede experimentar un aumento o disminución en su concentración debido a una serie de mecanismos. El destino de los contaminantes resulta de la interacción entre la transferencia de masa y los procesos cinéticos involucrados. Estos modelos pueden ser herramientas valiosas para predecir el comportamiento de dichos compuestos en diferentes medios, incluido el suelo, lo que permite reducir los costos de trabajo y materiales en una gran cantidad de experimentos químicos. Además, en situaciones donde los experimentos in situ son inviables debido a problemas ambientales específicos, estos modelos se convierten en un instrumento crucial para comprender la contaminación en el suelo, así como el destino y comportamiento final de los contaminantes (Wang et al., 2013).

Las variaciones en los niveles de contaminantes en el suelo están influenciadas por procesos físicos, químicos y biológicos. En cuanto a los cambios físicos, dos procesos clave son especialmente relevantes: la advección y la dispersión. La advección se refiere al transporte de partículas impulsado por el movimiento del fluido, o al transporte generado por un sistema de corrientes, como las de ríos o mares, que son originadas por un gradiente de presión o por corrientes causadas por diferencias de densidad. Así, el transporte advectivo se describe mediante el vector de flujo a lo largo de un eje específico, considerando el área perpendicular a dicho eje (Juárez, 2016; Zoppou y Knight, 1997).

La dispersión, por otro lado, se refiere a los procesos de transporte de sustancias disueltas o partículas, los cuales están estrechamente vinculados al movimiento

de las masas de agua; es decir, la propagación de una sustancia (o contaminante) que se distribuye o esparce en un medio debido a la acción de corrientes o variaciones en el flujo del medio en el que se encuentra. En el medio poroso la dispersión depende de los caminos de flujo que toman las partículas, algunos de los caminos de flujo son más rápidos porque siguen una vía más directa o porque pasan por poros más grandes o por el centro de poros en los que el agua fluye más rápido al haber menor fricción, caso contrario a lo ocurrido en vías más lentas. El valor numérico de la dispersión es el producto de la velocidad advectiva del agua y la dispersividad; la dispersividad es una propiedad característica del medio poroso y difiere en valor para cada uno de los componentes espaciales, por ejemplo, si todos los poros son casi del mismo tamaño, la dispersividad del medio sería baja (Somlyody y Varis, 1992; Torres-Marchena y Torres-Bejarano, 2015).

El modelo matemático que describe los dos procesos se conoce como ecuación de Advección-Dispersión, que se representa de la siguiente manera:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} = \nabla \cdot (\theta D \nabla C - qC) + R_s \quad (5.5)$$

donde C es la concentración del soluto en el suelo, D el coeficiente de dispersión del agua y R_s el término relacionado con la fuente o sumidero del soluto debido a la extracción por plantas; para el caso de θ (contenido de humedad del suelo) y q (flujo de Darcy), éstos son obtenidos de la ecuación de Richards (Ecuación 5.4) (Guevara, 2004).

6.1. Discretización del modelo

La discretización de un modelo implica transformar variables o funciones continuas en discretas, ya que las versiones discretas son relativamente más fáciles de analizar que sus equivalentes continuas (Dougherty et al., 1995). En un modelo numérico, la discretización espacial se determina por la cantidad y el tamaño de las cuadrículas utilizadas. A medida que se incrementa la cantidad de cuadrículas, tanto la precisión como el tiempo computacional de la simulación mejoran, hasta alcanzar un número óptimo de cuadrículas (Ribeiro et al., 2001).

Existen diversos enfoques para discretizar las ecuaciones que describen el comportamiento de los sistemas naturales, entre los cuales destaca el método de diferencias finitas. Este método tiene como objetivo proporcionar una solución numérica diferencial que permita representar matemáticamente un sistema dinámico y continuo. Se basa en la aproximación de las derivadas parciales mediante expresiones algebraicas que dependen de los valores de la variable en un conjunto limitado de puntos elegidos. Como consecuencia de esta aproximación, la ecuación diferencial parcial que describe el problema se transforma en un conjunto finito de ecuaciones algebraicas, en las cuales las incógnitas son los valores de la variable dependiente en los puntos seleccionados (Causon y Mingham, 2010). Según Chapra y Canale (2006), el método de diferencias finitas, basado en la expansión de la serie de Taylor, divide el continuo en nodos, como se ilustra en la siguiente figura:

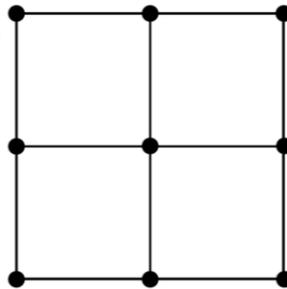


Figura 3. Diferencias finitas.

Adaptado de: Chapra y Canale (2006).

6.2. Malla numérica

Con el fin de resolver las ecuaciones diferenciales parciales que definen el comportamiento de las variables a modelar, es necesario dividir el área de estudio o dominio espacial del modelo en áreas más pequeñas y simples conocidas como celdas, que definen un área de cálculo o una malla numérica. La forma de la malla determina implícitamente el grado de precisión de la aproximación que se aumentará, ya que a mayor número de celdas mejor precisión, aunque el costo computacional requerido para dar una solución será mayor (De La Cruz, 2005).

La malla constituye una representación discreta de la geometría del dominio en el cual se resolverá el problema. Divide el dominio en un número finito de subdominios, como elementos o volúmenes de control, en los cuales se calculan las distintas variables involucradas en las ecuaciones de conservación. Se han definido dos tipos de mallas: estructuradas y no estructuradas. En las mallas estructuradas, cada elemento de control tiene un número constante de elementos vecinos, lo que les otorga una geometría regular. En contraste, las mallas no estructuradas están formadas por elementos de control con números variables de vecinos, organizándose en un mosaico de formas simples. Los modelos numéricos emplean mallas de ambos tipos, compuestas por celdas con formas definidas, como cuadrados o rectángulos, y generalmente se basan en métodos como las diferencias finitas o los volúmenes finitos (**Figura 4**) (Sámano-Celorio, 2011).

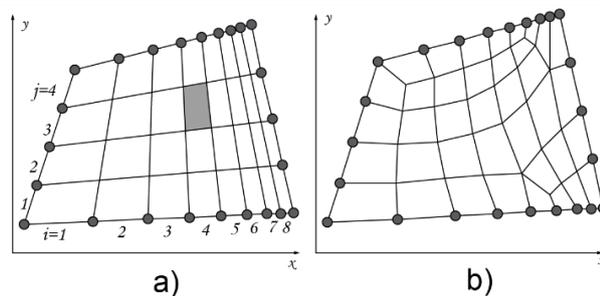


Figura 4. Mallas numéricas estructuradas (a) y no estructuradas (b).

Fuente: Cimbalá y Cengel (2001).

6.3. Condiciones iniciales

Las condiciones iniciales se refieren al valor asignado a la variable de interés que se desea modelar en el momento inicial, es decir, al estado de la simulación al comienzo del proceso. Esto se debe a que muchos modelos matemáticos están fundamentados en ecuaciones diferenciales ordinarias o parciales, que requieren un valor inicial. Para poder simular la evolución de la variable a lo largo del tiempo, es imprescindible definir su valor en el tiempo inicial en todo el dominio espacial del modelo (MADS, 2018).

6.4. Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera se refieren a los valores, funciones o distribuciones de una variable o de sus derivadas espaciales en un punto, región o volumen dentro del dominio espacial durante todo el tiempo de la simulación. Estas condiciones vinculan el sistema natural que se modela con su entorno y están relacionadas con las variables de entrada del modelo (Mateus et al., 2018). Son esenciales para definir el comportamiento del sistema en los límites del dominio de estudio. Hay tres tipos comunes de condiciones de frontera, denominadas condiciones de frontera de Dirichlet, Neumann y Robin, que se utilizan para especificar valores en la frontera de un dominio; por ejemplo, en una condición de Dirichlet, se especifica el valor directo de la variable en el contorno del dominio, es decir, podría indicar que la concentración de un soluto en la frontera del suelo tiene un valor constante; en una condición de Neumann, se especifica la derivada normal (o el flujo) de la variable en la frontera, podría expresar que no hay flujo de agua a través de la frontera del suelo; y la condición de Robin es una combinación lineal de las condiciones de Dirichlet y Neumann, en la que se especifica tanto el valor de la variable como su derivada en la frontera (Kim et al., 2020).

VI. METODOLOGÍA

1. Área de estudio

La zona de estudio abarca suelos de Colombia y México, el caso 1 (C1) corresponde a un suelo arcillo limoso localizado en una parcela agrícola experimental del campus central de la Universidad de Córdoba en Montería, Colombia; este punto está localizado sobre los $8^{\circ}47'25''N$ y $75^{\circ}51'31''W$ (**Figura 5**); esta área forma parte de la región Caribe de Colombia, cuyo clima se ve afectado por los vientos del sistema pacífico, los vientos alisios provenientes del sudeste y noreste, así como por las brisas marinas del Caribe. La precipitación media anual es de 1,300 mm y la temperatura promedio del aire es elevada, alcanzando los $32^{\circ}C$ (Combatt Caballero et al., 2005).

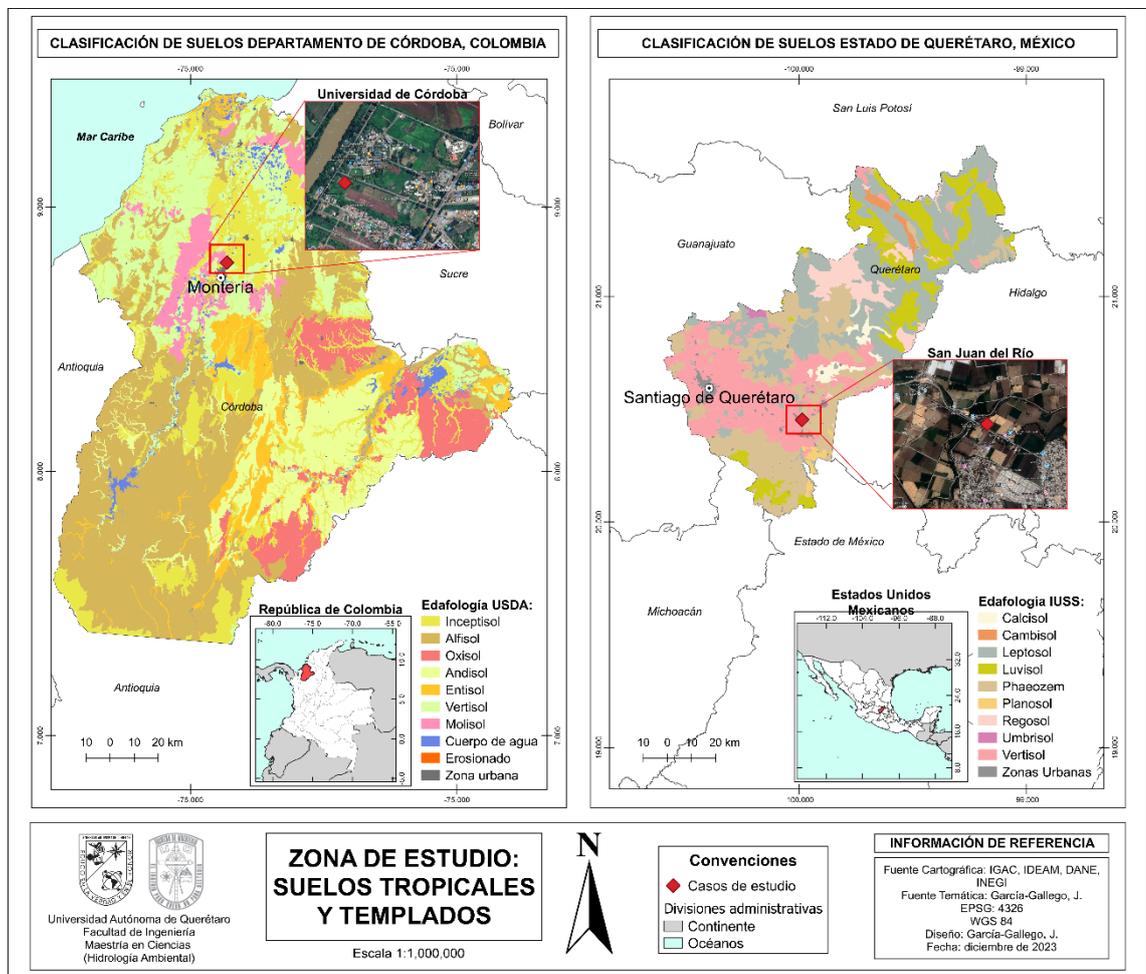


Figura 5. Localización de los casos de muestreo en suelos.

Los suelos de esta zona se sitúan sobre un relieve de llanura de inundación, provienen de sedimentos finos y medios y tienden a ser moderadamente profundos, con texturas medianamente finas y muy finas, tienden a ser susceptibles a inundaciones, presentando ocasionalmente encharcamientos, también poseen un drenaje natural pobre y alta fertilidad, estos suelos se identifican dentro del orden inceptisol según la carta edafológica para el Departamento de Córdoba (Gobernación de Córdoba, 2010; IGAC, 2009).

El caso 2, localizado sobre los 20°27'12.2"N y 99°59'10.8"W, corresponde a suelos agrícolas de textura franco limosa localizados en el municipio de San Juan del Río, Estado de Querétaro, México (**Figura 5**). El clima en esta zona es semiseco semicálido, la temperatura promedio varía entre los 16 y 17 °C, y las precipitaciones medias anuales entre 550 y 590 mm, presentándose especialmente en el verano (Alvarez-Manilla Aceves et al., 2002; CONAGUA, 2020). Los suelos se encuentran sobre un relieve de llanuras de inundación, tratándose de suelos aluviales cuaternarios que se sitúan sobre materiales volcanoclásticos del Terciario Superior; tienden a ser un poco profundos y fértiles, se identifican dentro del orden de los vertisoles según la carta edafológica del Estado de Querétaro (CONCYTEQ, 2002; INEGI, 2021).

2. Evaluación de las características fisicoquímicas de los suelos

2.1. Clasificación de los tipos de suelos a utilizar

Partiendo del orden de suelos disponible, se utilizó la base de referencia mundial del recurso suelo de la FAO (IUSS Working Group WRB, 2015), que sienta los lineamientos del sistema internacional de clasificación de suelos para la nomenclatura de suelos y la creación de leyendas de mapas de suelos. A través de la cartografía, se identificaron las unidades de suelo relevantes y se llevó a cabo una inspección de campo para reconocer los horizontes diagnósticos de los suelos a analizar, lo que permitió realizar la clasificación correspondiente de dos tipos de suelos (IGAC, 2021).

2.1.1. Fase de Campo

Teniendo en cuenta la Norma Oficial Mexicana NOM-021 (2002) que establece las especificaciones de fertilidad, salinidad y clasificación de suelos para estudios, muestreos y análisis, se realizó un muestreo con propósito de clasificación de suelos. Este muestreo se realizó después de analizar los parámetros detallados en material cartográfico disponible en cada país; se identificaron áreas con patrones similares de distribución de suelos, tanto a gran como a pequeña escala, lo que permitió seleccionar puntos de muestreo representativos. En el lugar de recolección, se abrió un perfil representativo y se tomaron muestras de cada uno de los horizontes que componen los diferentes tipos de suelo objeto de estudio.

Para la definición del número de puntos de muestreo en cada unidad de suelo analizado se tuvieron en cuenta los lineamientos establecidos por la Norma Mexicana NMX-AA-132-SCFI-2016. Se consideró el muestreo de detalle para un área regular menor a 0.1 a 0.2 ha, tomando así, una muestra en cada esquina (4) y una en el fondo (1) para un total de cinco submuestras, para así obtener una muestra compuesta, como se evidencia en la **Figura 6**, con el objetivo de que el punto seleccionado sea lo más representativo posible del área, basándose en los perfiles y perforaciones realizados previamente durante la etapa de reconocimiento del patrón natural y el desarrollo de los suelos.

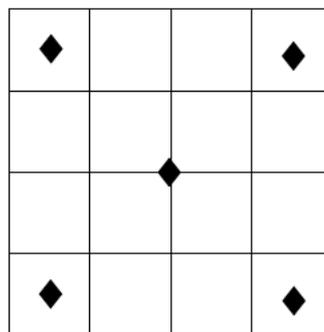


Figura 6. Localización de puntos de muestreo.

Fuente: Secretaría de Economía (2016)

Una vez obtenida la muestra, se registraron datos como el lugar, número de perfil, profundidad o espesor de la capa y fecha de muestreo. En campo, se analizaron características del perfil como:

- **Identificación de horizontes:** Para la identificación los horizontes se tuvieron en cuenta tanto la dureza de éstos, como las variaciones en el color. Utilizando un cuchillo se determinó la facilidad o dificultad con la que este penetró el suelo, requiriendo cierto grado diferente de fuerza de aplicación.
- **Espesor de los horizontes identificados:** Se utilizó una cinta métrica para medir de arriba hacia abajo la profundidad de los horizontes identificados (FAO, 2014).

2.1.2. Fase de laboratorio

- **Características del suelo en laboratorio**

En laboratorio se realizó el análisis del contenido de humedad del suelo, la densidad aparente, la densidad real, el carbono orgánico, el contenido de materia orgánica y el pH mediante las técnicas señaladas en la **Tabla 1**; para el caso C1 fueron analizadas en el Laboratorio de Suelos y Aguas de la Universidad de Córdoba (Colombia) mientras que para el caso C2 se determinaron en el Laboratorio GRUTAR de la Universidad Autónoma de Querétaro (México).

Tabla 1. Métodos de laboratorio usados para la determinación de las características de los suelos.

Parámetro	Técnica	Documento normativo
Humedad	Gravimetría	Métodos analíticos del laboratorio de suelos del Instituto Agustín Codazzi (2006).
Densidad aparente	Terrón parafinado	
Densidad real	Alcohol	NTC 5403:2021-05-19 segunda actualización, numerales 4.3 método de extracción: B. oxidación húmeda.
Carbono orgánico	Titulometría	
Materia orgánica	Gravimetría	

Parámetro	Técnica	Documento normativo
pH	Potenciometría	NTC 5264:2018-10-17 segunda actualización, numeral 5.

- **Granulometría de los suelos**

Asimismo, se determinó la granulometría de los suelos siguiendo la norma ASTM D 422-63 (2007) de la Sociedad Estadounidense para Pruebas y Materiales (ASTM, por sus siglas en inglés), en la que, posterior al secado y tamizado por la malla de 2 mm, se procedió a realizar el análisis granulométrico por mallas, utilizando la serie mostrada en la **Tabla 2**.

Tabla 2. Distribución de mallas usadas para el análisis granulométrico

Tamiz N°	Abertura nominal (mm)
10	2
20	0.850
40	0.425
60	0.250
80	0.200
100	0.150
120	0.125
150	0.105
200	0.075

Fuente: Cabrera et al. (2019)

Después de realizar el cribado, se utilizó el material que pasó a través de la malla N° 200, el cual se secó en horno durante 72 horas. A partir del material secado, se extrajeron entre 75 y 100 g de material arenoso, y entre 50 y 60 g para limos y arcillas (en peso seco). Este material se mantuvo en saturación dentro de una tara durante 16 horas. Para dispersar los grumos generados por las partículas del suelo, se empleó hexametáfosfato de sodio al 4 % como defloculante (ASTM D422, 2007).

Se realizaron las respectivas calibraciones de hidrómetros, correcciones por menisco y corrección del cero en cada una de las muestras analizadas, posteriormente se realizó la prueba vertiendo el suelo hasta aforarlo con agua destilada en una probeta de 1000 mL, se agitó vigorosamente y se midieron las lecturas del hidrómetro a los 20, 40, 60, 120 y 180 segundos (por triplicado) y posteriormente a los 4, 8, 15 y 30 minutos, y a las 1, 2, 4, 8, 24 y 48 horas.

Con esto se obtuvo el porcentaje más fino del material analizado y conjugado con los tamaños de partículas y su fracción porcentual obtenidos en el cribado, se generó la curva granulométrica (diámetros de partículas vs. Frecuencia acumulada) con la que se determinaron los porcentajes de arena, limo y arcilla y la clase textural mediante el triángulo textural mostrado en la **Figura 7**.

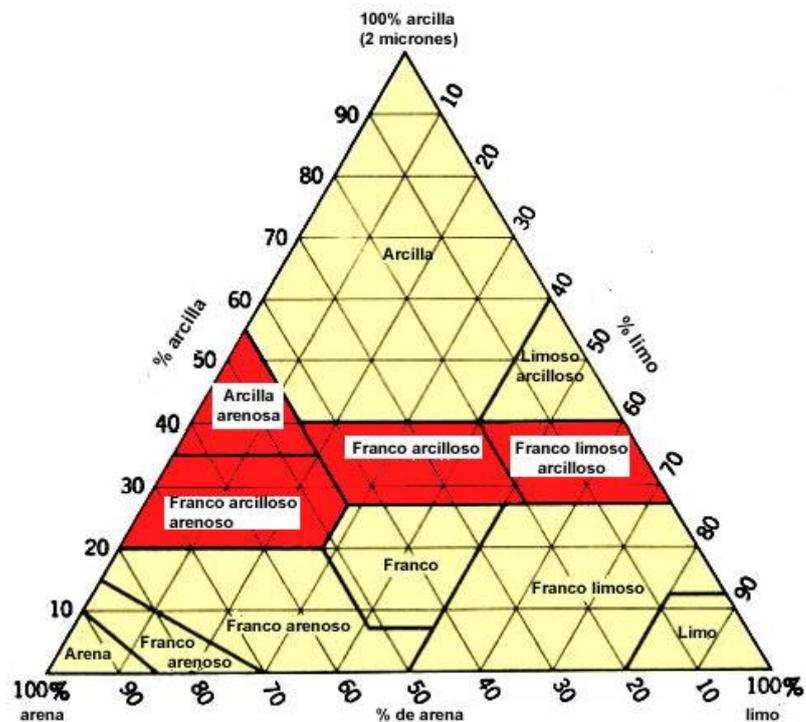


Figura 7. Triángulo textural.

Fuente: FAO (2014).

- **Determinación de la concentración de glifosato**

El análisis de la concentración de glifosato en el suelo y el lixiviado de C1 se realizaron por cromatografía de gases en el Laboratorio de Servicios Ambientales de la Universidad de Cartagena, Colombia. Mientras que para el

caso 2 se analizaron mediante espectrofotometría en el Centro de Investigación en Química para la Economía Circular (CIQEC), afiliado a la Universidad Autónoma de Querétaro, México, para lo cual se realizaron los siguientes procedimientos:

Extracción del suelo: Para la extracción del glifosato del suelo se siguió la técnica recomendada por Druart et al. (2011), en el que se tomaron 5 g de cada muestra de suelo y se disolvieron en 40 mL de agua destilada, posteriormente se agitaron durante 1 h, con un descanso de 1.5 h para luego volver a agitar 1 h, así, se centrifugaron durante 20 minutos a 3000 rpm; del sobrenadante se tomaron las respectivas muestras para el análisis de glifosato.

Análisis de glifosato: Tanto para las muestras extraídas del suelo como para las muestras de lixiviado obtenidas en cada prueba, se siguió el método propuesto por Bhaskara & Nagaraja (2006), el cual consiste en tomar 0.5 mL de la muestra y agregarle 1 mL de solución de Ninhidrina al 3 % más 1 mL de solución de Molibdato de sodio al 3 % y hacerlos reaccionar en un baño de María (90 – 100 °C) por 10 minutos, para luego medir la absorbancia en el espectrofotómetro a 570 nm, donde la concentración del glifosato está dada por:

$$\text{Concentración} = \frac{0.0168 + \text{absorbancia}}{0.0065} \quad (6.1)$$

3. Determinación de las características hidrodinámicas del suelo: curva de retención de humedad y curva de conductividad hidráulica

3.1. Fase de modelación numérica

Para resolver la ecuación de Richards, es necesario contar con las características hidrodinámicas del suelo, como la curva de retención de humedad y la curva de conductividad hidráulica. La CRH se obtuvo utilizando el modelo clásico de van Genuchten (1980), mientras que para la curva de conductividad hidráulica se emplearon los modelos propuestos por Fuentes et al. (2020). Con estos datos, se calculó el vector de velocidad de Darcy, que permitió resolver la ecuación de Advección-Dispersión (Ecuación 5.5) (Qi et al., 2022).

Para la fase de modelación numérica del trabajo de investigación se utilizó el lenguaje de programación Visual Studio.

3.1.1. Estimación de la curva de retención de humedad

De la curva de retención de humedad de van Genuchten (1980) se tiene:

$$\theta(\psi) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{\left[1 + \left(\frac{\psi}{\psi_d}\right)^n\right]^m} \quad (6.2)$$

donde θ_r corresponde a la humedad residual del suelo, θ_s la humedad a saturación, ψ el potencial de presión, ψ_d una presión característica del suelo, y m y n son coeficientes de forma que resultan de la curva granulométrica.

- **Estimación de m y n a partir de la curva granulométrica y porosidad**

La estimación de estos parámetros se realizó utilizando el modelo propuesto por Fuentes-Ruiz (1992) el cual se basa en los principios de la geometría fractal de Mandelbrot (1982). Este modelo establece una relación entre el tamaño de los poros y las partículas a partir de la curva granulométrica y la porosidad del suelo, utilizando la siguiente ecuación:

$$F(D) = \left[1 + \left(\frac{D_d}{D}\right)^{\frac{n}{2(1-s)}}\right]^{-m} \quad (6.3)$$

donde $F(D)$ hace referencia a la frecuencia acumulada, que está basada en el peso de las partículas que tienen un diámetro menor o igual a D . Por su parte, D_d corresponde a un parámetro estimado del tamaño de partículas, y m y n los parámetros de forma; m se estima partiendo de la curva granulométrica y la porosidad total del suelo mientras la curva experimental obtenida con los datos medidos se ajuste a la función de distribución de la Ecuación (6.3). Para esto, fue necesario calcular el parámetro de dimensión fractal del suelo, que se obtuvo estimando la porosidad del suelo (Φ) a partir de su densidad aparente (ρ_t) y la densidad de los sólidos (ρ_s), para la cual se consideró la del cuarzo (2.65 g/cm³):

$$\phi = \frac{\rho_t}{\rho_s} \quad (6.4)$$

Posteriormente, se calculó la dimensión fractal relativa (s) de cada suelo mediante la siguiente ecuación:

$$(1 - \phi)^s + \phi^{2s} = 1 \quad (6.5)$$

3.1.2. Estimación de la curva de conductividad hidráulica

Para la conductividad hidráulica se utilizaron los siguientes modelos propuestos por Fuentes et al. (2003), para cada suelo se calculó la raíz del error medio cuadrático (RMSE) y se escogió el modelo que presentara menor valor de RMSE, es decir, que se ajustara mejor a las características granulométricas de los suelos analizados:

- Poro de la media geométrica:

$$K(\theta) = K_s \left[1 - \left(1 - \theta^{1/m} \right)^{sm} \right]^2, 0 < sm = 1 - \frac{2s}{n} < 1 \quad (6.6)$$

- Poro neutro:

$$K(\theta) = K_s \theta^s \left[1 - \left(1 - \theta^{1/m} \right)^{sm} \right], 0 < sm = 1 - \frac{4s}{n} < 1 \quad (6.7)$$

- Poro grande:

$$K(\theta) = K_s \left[1 - \left(1 - \theta^{1/m} \right)^{2sm} \right], 0 < 2sm = 1 - \frac{4s}{n} < 1 \quad (6.8)$$

donde $\theta = (\theta - \theta_r)/(\theta_s - \theta_r)$ es el grado efectivo de saturación, s la dimensión fractal relativa definida por $s = D/E$, con D como la dimensión fractal del suelo, E la dimensión de Euclides del espacio físico. Mientras que m y n representan parámetros de forma de la ecuación de van Genuchten (1980).

3.1.3. Condiciones iniciales, condiciones de frontera y método de discretización del modelo

Se trabajó con una condición de carga constante para C1, en la cual se mantuvo una lámina de 1 cm hasta que cayó la primera gota de lixiviado y una combinación de carga constante y variable para C2, en la cual se aplicó una carga constante de solución de glifosato y una vez se produjo la primera gota se manejó carga variable, registrando los tiempos de descenso de la carga y recolectando los volúmenes y tiempos de lixiviado cada que se registraba un descenso de 0.5 cm en la lámina de agua. Para la condición límite inferior del modelo, se consideró un flujo nulo para cuando no se habían generado lixiviados, y una vez generados, se definió una función de flujo de salida en función del tiempo con valores de caudal medidos para C2; mediante las siguientes consideraciones:

- Condición inicial:

$$\theta = \theta_{ini} \quad \text{para } 0 \leq z \leq L \quad \text{y} \quad t = 0 \quad (6.9)$$

- Condición en la frontera superior para carga constante:

$$\psi = \psi_{cte} \quad \text{para } z = 0 \quad 0 < t < t_1 \quad (6.10)$$

- Condición en la frontera superior para carga variable en C2 (tiempo en horas):

$$h_{sup} = 1 * 10^{-4}t^2 - 0.0359t + 3.1793 \quad t > t_1 \quad (6.11)$$

- Condición en la frontera inferior:

$$q = -K(\psi) \frac{\partial(\psi - z)}{\partial z} = 0 \quad \text{para } z = L \quad \text{y} \quad 0 < t < t_1 \quad (6.12)$$

- Condición de frontera inferior de flujo de lixiviado (C2, tiempo en horas):

$$qz = 3553.4t^{-1.063} \quad t > t_1 \quad (6.13)$$

donde L representa la longitud de la comuna, ψ el potencial de presión (succión) del agua, θ el contenido de agua, $hsup$ la carga superficial de agua en cm, t_1 corresponde al tiempo de caída de la primera gota de lixiviado y z la profundidad.

Además, las condiciones iniciales y de contorno para la ecuación de Advección-Dispersión (donde C es el gradiente de la concentración de glifosato) son:

- Condición inicial de concentración de glifosato en g/kg:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial z} = (z = 0, t) = 4.68 & \quad \text{para Caso 1} \\ \frac{\partial C}{\partial z} = (z = 0, t) = 17.57 & \quad \text{para Caso 2} \end{aligned} \quad (6.14)$$

- Condición de frontera superior de concentración de glifosato en g/L (tipo Dirichlet):

$$\begin{aligned} C(z, t_1) &= C_0 \\ C(z, > t_1) &= 40.33 \end{aligned} \quad (6.15)$$

donde t_1 es el tiempo de aplicación del glifosato en la columna de suelo y C_0 la concentración aplicada.

- Condición de frontera inferior de concentración de glifosato (Gradiente cero para C1):

$$\frac{\partial C}{\partial z} = 0 \quad (6.16)$$

- Condición de frontera inferior de concentración de glifosato (condición de Neumann para C2):

$$C_n^k = 4 * 10^{-7}t^4 - 0.0001t^3 + 0.013t^2 - 0.4816t + 18.205 \quad (6.17)$$

3.2. Solución numérica de Richards: Diferencias finitas en una dimensión

Se utilizó el método de diferencias finitas para llevar a cabo la resolución de las ecuaciones; se escogió un tamaño de cuadrícula (discretización) y paso de

tiempo que permitiera representar bien el fenómeno de dispersión del contaminante en cada caso estudiado y captar la variación del contenido de humedad. Mediante el uso del método inverso para la determinación de las características hidrodinámicas del suelo, se aplicó el algoritmo de optimización Levenberg-Marquardt y con los resultados del ensayo de infiltración se estimaron los parámetros de difícil acceso (K_s y ψ_d) de la ecuación de Richards, siguiendo la metodología descrita en Fuentes & Rendón (2012). Así,

la ecuación diferencial unidimensional de Richards, resultante de la combinación de la ecuación de continuidad (Ecuación 6.19) y de la ley de Darcy (Ecuación 6.20), se expresa como:

$$C(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\psi) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} - 1 \right) \right] - \Upsilon \quad (6.18)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial q_z}{\partial z} = \Upsilon \quad (6.19)$$

$$q_z = K(\psi) - K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad (6.20)$$

En el desarrollo de la solución numérica es necesario utilizar el esquema de balance local, propuesto por Zataráin et al. (1998) citado en Fuentes & Rendón (2012), el que se divide el perfil de suelo en capas (Δz) que pueden no ser constantes, como se muestra en la **Figura 8**.

El dominio, correspondiente a la columna de suelo, se discretizó en nodos distribuidos de manera no uniforme para capturar adecuadamente las variaciones espaciales del flujo y el contenido de agua. Se añadieron tres nodos adicionales en los extremos del dominio para representar correctamente las condiciones de frontera. Las posiciones de los nodos (z) fueron calculadas iterativamente, definiendo un refinamiento local mediante un delta espacial ajustado (Δz). El grosor de las capas se definió como una función de las posiciones de los nodos, comenzando con valores iniciales para las primeras y últimas capas, mientras que las intermedias se calcularon iterativamente con el

mismo esquema de interpolación ponderada, lo que asegura una malla consistente que respeta la heterogeneidad espacial del suelo.

Los parámetros de interpolación espacial (γ_z) y temporal (ω), definidos para $i = 1, 2, \dots$ y $k=1, 2, \dots$ se definen por:

$$\gamma_z = \frac{Z_{i+\gamma_z} - Z_i}{Z_{i+1} - Z_i}; \text{ donde } 0 \leq \gamma_z \leq 1 \quad (6.21)$$

$$\omega = \frac{t_{k+\omega} - t_k}{t_{k+1} - t_k}; \text{ donde } 0 \leq \omega \leq 1 \quad (6.22)$$

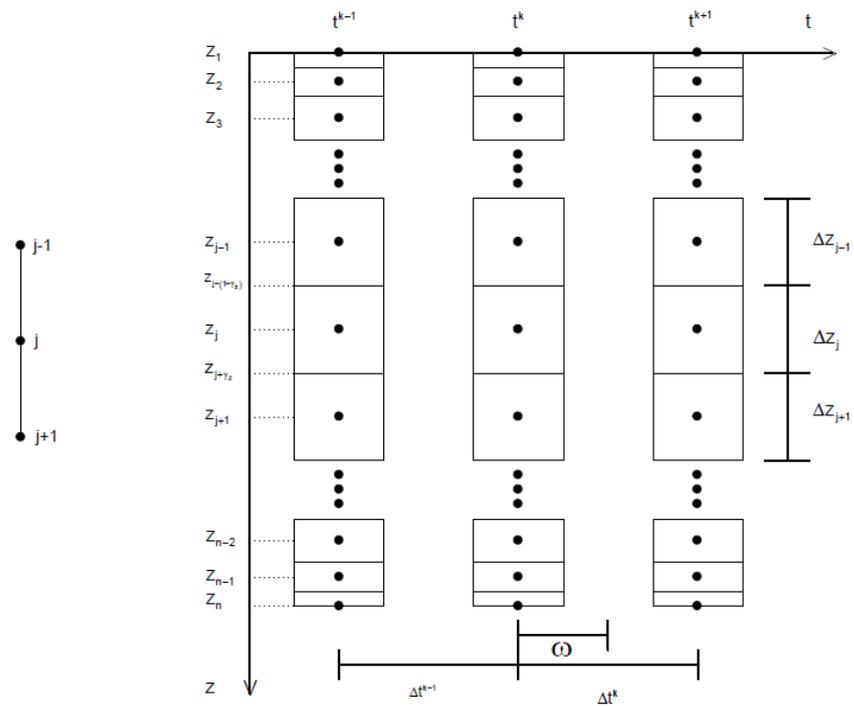


Figura 8. Discretización del medio.

Fuente: Fuentes & Rendón (2012).

La presión ψ en un nodo intermedio $i + \gamma_z$ para todo k se estimó con:

$$\psi_{i+\gamma_z}^k = (1 - \gamma_z) \psi_i^k + \gamma_z \psi_{i+1}^k \quad (6.23)$$

En donde la presión anterior $\psi_{i+\gamma_z}^k$ se deduce reemplazando i por $i - 1$ en la Ecuación (6.23). Mientras que la presión en el tiempo intermedio $k + \omega$, para todo i se estimó con:

$$\psi_i^{k+\omega} = (1 - \omega) \psi_i^k + \omega \psi_i^{k+1} \quad (6.24)$$

La discretización de la variable temporal de la ecuación de continuidad (Ecuación 6.19) correspondiente al nodo i -ésimo se calcula así:

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial t} \right|_i^{k+\omega} = C(\psi) \left. \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|_i^{k+\omega} = \frac{C_i^{k+\omega}}{\Delta t_k} (\psi_i^{k+1} - \psi_i^k); \quad \Delta t_k = t_{k+1} - t_k \quad (6.25)$$

Mientras que la discretización de la derivada espacial de la Ecuación (6.19), es la siguiente:

$$\left. \frac{\partial q_z}{\partial z} \right|_i^{k+\omega} = \frac{q_z|_{i+\gamma_z}^{k+\omega} - q_z|_{i-1+\gamma_z}^{k+\omega}}{\Delta z_i}; \quad \Delta z_i = (1 - \gamma_z)(z_i - z_{i-1}) + \gamma_z(z_{i+1} - z_i) \quad (6.26)$$

Y, de acuerdo con la ecuación de Darcy (Ecuación 6.20):

$$q_z|_{i+\gamma_z}^{k+\omega} = K_{i+\gamma_z}^{k+\omega} - K_{i+\gamma_z}^{k+\omega} \frac{\psi_{i+1}^{k+\omega} - \psi_i^{k+\omega}}{z_{i+1} - z_i} \quad (6.27)$$

donde $K_{i+\gamma_z}^{k+\omega} = K(\psi_{i+\gamma_z}^{k+\omega})$. Y donde también el flujo dado por $q_z|_{i-1+\gamma_z}^{k+\omega}$ se obtiene reemplazando i por $i - 1$ en la Ecuación (6.27).

Así, la variable dependiente que interviene en la conductividad hidráulica de la Ecuación (6.27) está definida por:

$$\psi_{i+\gamma_z}^{k+\omega} = (1 - \omega)[(1 - \gamma_z)\psi_i^k + \gamma_z\psi_{i+1}^k] + \omega[(1 - \gamma_z)\psi_i^{k+1} + \gamma_z\psi_{i+1}^{k+1}] \quad (6.28)$$

Y la presión $\psi_{i-1+\gamma_z}^{k+\omega}$ se obtiene reemplazando i por $i - 1$ en la Ecuación (6.28).

Que conduce al sistema de ecuaciones algebraicas que se muestra a continuación:

$$A_i \psi_{i-1}^{k+1} + B_i \psi_i^{k+1} + D_i \psi_{i+1}^{k+1} = E_i; \quad i = 2, 3, \dots, n - 1 \quad (6.29)$$

Como los coeficientes A_i , B_i , D_i y E_i dependen de la solución misma y la resolución en cada paso de tiempo es iterativa, el primer estimador se obtuvo utilizando el esquema de Laasonen; este esquema se basa en que los coeficientes mencionados, la capacidad específica y la conductividad hidráulica se determinan en el tiempo anterior, mientras que el gradiente hidráulico es calculado en el tiempo actual, lo que elimina la necesidad de iteración en cada paso de tiempo. De esta manera, los coeficientes se calcularon inicialmente de la siguiente forma:

$$A_i = -\frac{K_{i-1+\gamma z}^k}{\Delta z_i (z_i - z_{i-1})} \quad (6.30)$$

$$D_i = -\frac{K_{i+\gamma z}^k}{\Delta z_i (z_{i+1} - z_i)} \quad (6.31)$$

$$B_i = \frac{C_i^k}{\Delta t_k} - A_i - D_i \quad (6.32)$$

$$E_i = -\frac{C_i^k}{\Delta t_k} \psi_i^k + \frac{K_{i-1+\gamma z}^k}{\Delta z_i} - \frac{K_{i+\gamma z}^k}{\Delta z_i} - \gamma_i^k \quad (6.33)$$

Así, una vez obtenido el primer estimador, se procedió a aplicar el algoritmo predictor corrector asegurando que la convergencia de las iteraciones se dé cuando el error entre los valores estimados y corregidos resulte menor o igual a 1×10^{-6} , para lo que fueron utilizados los coeficientes del esquema de balance local, que son los siguientes:

$$A_i = -\omega \frac{K_{i-1+\gamma z}^{k+\omega}}{\Delta z_i (z_i - z_{i-1})} \quad (6.34)$$

$$D_i = -\omega \frac{K_{i+\gamma z}^{k+\omega}}{\Delta z_i (z_{i+1} - z_i)} \quad (6.35)$$

$$B_i = \frac{C_i^{k+\omega}}{\Delta t_k} - A_i - D_i \quad (6.36)$$

$$E_i = \frac{(1-\omega)K_{i-1+\gamma_z}^{k+\omega}}{\Delta z_i(z_i - z_{i-1})} \psi_{i-1}^k + \left\{ \frac{C_i^{k+\omega}}{\Delta t_k} - \frac{1-\omega}{\Delta z_i} \left[\frac{K_{i+\gamma_z}^{k+\omega}}{(z_{i+1} - z_i)} + \frac{K_{i-1+\gamma_z}^{k+\omega}}{(z_i - z_{i-1})} \right] \right\} \psi_i^k + \frac{(1-\omega)K_{i+\gamma_z}^{k+\omega}}{\Delta z_i(z_{i+1} - z_i)} \psi_{i+1}^k + \frac{K_{i-1+\gamma_z}^{k+\omega}}{\Delta z_i} - \frac{K_{i+\gamma_z}^{k+\omega}}{\Delta z_i} - \Upsilon_i^{k+\omega} \quad (6.37)$$

Debido a que el sistema mostrado en la Ecuación (6.29) forma una matriz tridiagonal, tanto en la aplicación del esquema de Laasonen como en el esquema de balance local, se utilizó el algoritmo de eliminación gaussiana de Thomas (o doble barrido), que tiene la forma:

$$\psi_i^{k+1} = F_i - G_i \psi_{i+1}^{k+1}; \quad i = 1, \dots, n-1 \quad (6.38)$$

donde F_i y G_i vienen dados por:

$$F_i = \frac{E_i - A_i F_{i-1}}{B_i - A_i G_{i-1}}; \quad i = 2, \dots, n-1 \quad (6.39)$$

$$G_i = \frac{D_i}{B_i - A_i G_{i-1}}; \quad i = 2, \dots, n-1 \quad (6.40)$$

que para resolverlos se requiere de los valores iniciales en la condición de frontera superior ($z=0$), entonces se definió a F_1 como el valor de la carga superficial de agua y G_1 igual a cero, así se realiza el barrido hacia adelante ($i = 2, 3, \dots, n-1$) y enseguida se define ψ_n^{k+1} en la condición de frontera inferior ($z=L$) y se van calculando ψ_i^{k+1} para $i = n-1, n-2, \dots, 1$, realizándose así el barrido hacia atrás. Para la frontera inferior se definió una condición tipo Neumann dada por la siguiente expresión:

$$\psi_n^{k+1} = \frac{F_{n-1} - \left(\frac{q_z^n |^{k+1}}{K_n^{k+1}} - 1 \right) (z_n - z_{n-1})}{1 + G_{n-1}} \quad (6.41)$$

De este modo se obtuvo el perfil de humedad de los suelos para todo el tiempo de simulación. Posteriormente, a partir de integración numérica mediante la suma de trapecios se obtuvo la lámina infiltrada que fue optimizada para lograr un ajuste con los valores experimentales de la prueba de infiltración realizada en cada tipo de suelo.

3.3. Solución numérica de Advección-Dispersión: Diferencias finitas en una dimensión

Para solucionar numéricamente de la ecuación de Advección-Dispersión mediante el método de diferencias finitas, se tomó como referencia la investigación de Chávez (2010) en la cual, el transporte viene dado por:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(qC)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta Da \frac{\partial C}{\partial z} \right) + Rs \quad (6.42)$$

Para la solución de esta ecuación se utilizó esquema de discretización para la transferencia de agua mostrado en la **Figura 8** y se usaron los parámetros de interpolación espacial y temporal de las ecuaciones (6.21) y (6.22).

Así, la variable dependiente (Φ) en un nodo intermedio $i + \gamma_z$ para todo k se estima como:

$$\Phi_{i+\gamma_z}^k = (1 - \gamma_z)\Phi_i^k + \gamma_z\Phi_{i+1}^k \quad (6.43)$$

mientras que el en tiempo intermedio $k + \omega$ se estima como:

$$\Phi_i^{k+\omega} = (1 - \omega)\Phi_i^k + \omega\Phi_i^{k+\omega} \quad (6.44)$$

Entonces, la discretización de la derivada temporal en la ecuación de Advección-Dispersión unidimensional viene dada por:

$$\left. \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} \right|_i^{k+\omega} = \frac{\theta_i^{k+1} C_i^{k+1} - \theta_i^k C_i^k}{\Delta t_k} = b_2 C_i^{k+1} - b_1 C_i^k ; \Delta t_k = t_{k+1} - t_k \quad (6.45)$$

donde:

$$b_1 = \frac{\theta_i^k}{\Delta t_k} ; \quad b_2 = \frac{\theta_i^{k+1}}{\Delta t_k} \quad (6.46)$$

Y la discretización de la derivada espacial de esta misma ecuación resulta ser:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial qs}{\partial z} \right|_i^{k+\omega} &= \frac{qs|_{i+\gamma_z}^{k+\omega} - qs|_{i-1+\gamma_z}^{k+\omega}}{\Delta z_i} ; \quad \Delta z_i \\ &= (1 - \gamma_z)(z_i - z_{i-1}) + \gamma_z(z_{i+1} - z_i) \end{aligned} \quad (6.47)$$

El flujo de Darcy (Ecuación 6.20) viene dado por:

$$qs|_{i+\gamma_z}^{k+\omega} = q_{i+\gamma_z}^{k+\omega} C_{i+\gamma_z}^{k+\omega} - \theta_{i+\gamma_z}^{k+\omega} Da_{i+\gamma_z}^{k+\omega} \frac{C_{i+1}^{k+\omega} - C_i^{k+\omega}}{z_{i+1} - z_i} \quad (6.48)$$

Para $qs|_{i-1+\gamma_z}^{k+\omega}$ se reemplaza i por $i - 1$ en la Ecuación (6.47).

Así, conforme con la Ecuación (6.42) se tiene la siguiente interpolación espacial:

$$C_{i+\gamma_z}^k = (1 - \gamma_z)C_i^k + \gamma_z C_{i+1}^k \quad (6.49)$$

que para $C_{i+\gamma_z}^k$ se obtiene reemplazando i por $i - 1$ en la Ecuación (6.49).

Mientras que para la Ecuación (6.42), se presenta la siguiente interpolación temporal:

$$C_i^{k+\omega} = (1 - \omega)C_i^k + \omega C_i^{k+\omega} \quad (6.50)$$

Así, la variable dependiente que interviene en el término advectivo de la Ecuación (6.47) está definido como:

$$C_{i+\gamma_z}^{k+\omega} = (1 - \omega)[(1 - \gamma_z)C_i^k + \gamma_z C_{i+1}^k] + \omega[(1 - \gamma_z)C_i^{k+1} + \gamma_z C_{i+1}^{k+1}] \quad (6.51)$$

donde $C_{i-1+\gamma_z}^{k+\omega}$ se obtiene reemplazando i por $i - 1$ en la Ecuación (6.51). Y las variables dependientes en el término dispersivo de la Ecuación (6.48) están dadas por:

$$C_{i+1}^{k+\omega} = (1 - \omega)C_{i+1}^k + \omega C_{i+1}^{k+1} \quad (6.52)$$

$$C_i^{k+\omega} = (1 - \omega)C_i^k + \omega C_i^{k+1} \quad (6.53)$$

$$C_{i-1}^{k+\omega} = (1 - \omega)C_{i-1}^k + \omega C_{i-1}^{k+1} \quad (6.54)$$

La discretización de la derivada espacial mostrada en la Ecuación (6.47) considerando la Ecuación (6.48) puede ser escrita como:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial qs}{\partial z} \right|_i^{k+\omega} &= a_1 C_{i+\gamma_z}^{k+\omega} - a_2 (C_{i+1}^{k+\omega} - C_i^{k+\omega}) - a_3 C_{i-(1-\gamma_z)}^{k+\omega} \\ &+ a_4 (C_i^{k+\omega} - C_{i-1}^{k+\omega}) \end{aligned} \quad (6.55)$$

donde:

$$a_1 = \frac{q_{i+\gamma_z}^{k+\omega}}{\Delta z_i} \quad (6.56)$$

$$a_2 = \frac{\theta_{i+\gamma_z}^{k+\omega} D a_{i+\gamma_z}^{k+\omega}}{\Delta z_i (z_{i+1} - z_i)} \quad (6.57)$$

$$a_3 = \frac{q_{i-(1-\gamma_z)}^{k+\omega}}{\Delta z_i} \quad (6.58)$$

$$a_4 = \frac{\theta_{i-(1-\gamma_z)}^{k+\omega} D a_{i-(1-\gamma_z)}^{k+\omega}}{\Delta z_i (z_i - z_{i-1})} \quad (6.59)$$

Para lo cual, realizando las respectivas sustituciones se obtiene el sistema de ecuaciones algebraicas que sigue:

$$As_i\psi C_{i-1}^{k+1} + Bs_iC_i^{k+1} + Ds_iC_{i+1}^{k+1} = Es_i; \quad i = 1, 2, \dots, n - 1 \quad (6.60)$$

donde:

$$As_1 = -\omega[a_4 + (1 - \gamma_z)a_3] \quad (6.61)$$

$$Bs_1 = \omega[(1 - \gamma_z)a_1 + a_2 - \gamma_z a_3 + a_4] + b_2 \quad (6.62)$$

$$Ds_1 = \omega[\gamma_z a_1 - a_2] \quad (6.63)$$

$$\begin{aligned} Es_1 = & Rs_i^{k+\omega} + (1 - \omega)[a_4 + (1 - \gamma_z)a_3]C_{i-1}^k \\ & - \{(1 - \omega)[a_4 - \gamma_z a_3 + a_2 + (1 - \gamma_z)a_1] - b_1\}C_i^k \\ & - (1 - \omega)[\gamma_z a_1 - a_2]C_{i+1}^k \end{aligned} \quad (6.64)$$

El coeficiente de dispersión (Da) depende de la dispersividad (λd) y de la velocidad intersticial $\left(\frac{q_{i+\gamma_z}^{k+\omega}}{\theta_{i+\gamma_z}^{k+\omega}}\right)$ viene dado por:

$$Da_{i+\gamma_z}^{k+\omega} = \lambda d \left| \frac{q_{i+\gamma_z}^{k+\omega}}{\theta_{i+\gamma_z}^{k+\omega}} \right| \quad (6.65)$$

que para $Da_{i-(1-\gamma_z)}^{k+\omega}$ se obtiene reemplazando i por $i - 1$ en la Ecuación (6.65).

De manera similar a la solución utilizada para el modelo de transferencia de agua, se implementó el algoritmo de Thomas para resolver la matriz tridiagonal obtenida, que para el transporte de solutos tienen la forma:

$$C_i^{k+1} = Fs_i - Gs_iC_{i+1}^{k+1}; \quad i = 1, 2, \dots, n - 1 \quad (6.66)$$

donde Fs_i y Gs_i vienen dados por:

$$Fs_i = \frac{Es_i - As_iFs_{i-1}}{Bs_i - As_iGs_{i-1}}; \quad i = 2, 3, \dots, n - 1 \quad (6.67)$$

$$Gs_i = \frac{Ds_i}{Bs_i - As_i Gs_{i-1}}; \quad i = 2, 3, \dots, n - 1 \quad (6.68)$$

Así, se definen Fs_1 (concentración aplicada de glifosato en el suelo) y Gs_1 (cero) para la frontera superior ($z=0$), se inicia el barrido hacia adelante calculando Fs_i y Gs_i para $i = 2, \dots, n - 1$, allí se define C_n^{k+1} en la condición de frontera inferior y se inicia el barrido hacia atrás calculando C_i^{k+1} para $i = n - 1, n - 2, \dots, 2$. Para la frontera inferior se definió una condición tipo Neumann como la mostrada a continuación:

$$C_n^{k+1} = \frac{Fs_{n-1} - \frac{(z_n - z_{n-1})\{qs_n - (1 - \omega)[(1 - \gamma_z)(qC)_{n-1}^k + \gamma_z(qC)_n^k]\}}{Da_{n-(1-\gamma_z)}^{k+\omega} + (z_n - z_{n-1})\omega(1 - \gamma_z)q_{n-1}^{k+1}}}{\frac{Da_{n-(1-\gamma_z)}^{-k+\omega} - (z_n - z_{n-1})\omega\gamma_z q_n^{k+1}}{Da_{n-(1-\gamma_z)}^{-k+\omega} + (z_n - z_{n-1})\omega(1 - \gamma_z)q_{n-1}^{k+1}} + Gs_{n-1}} \quad (6.69)$$

4. Estimación del coeficiente de dispersividad del glifosato en los suelos agrícolas

4.1. Modelo de infiltración de glifosato en los suelos

Para realizar la prueba de infiltración del glifosato se utilizaron columnas fabricadas en tubo de acrílico de 10 cm de diámetro y cuyas dimensiones para cada tipo de suelo se muestran en la **Tabla 3**. Estos tubos se recubrieron parcialmente en su interior con cera para crear una rugosidad entre el suelo y la columna de acrílico y evitar la percolación de la solución en los bordes de la columna. El extremo inferior de las columnas se cerró con tapas de acrílico que contenían orificios para el paso del lixiviado. La **Figura 9** muestra un esquema de los prototipos utilizados.

Tabla 3. Dimensiones de las columnas utilizadas en el modelo de infiltración.

Suelo	Longitud capa de suelo (cm)	Lámina de agua de solución (cm)	Longitud libre (cm)	Longitud total (cm)
C1	50	1	9	60
C2	8	3.55	4	14

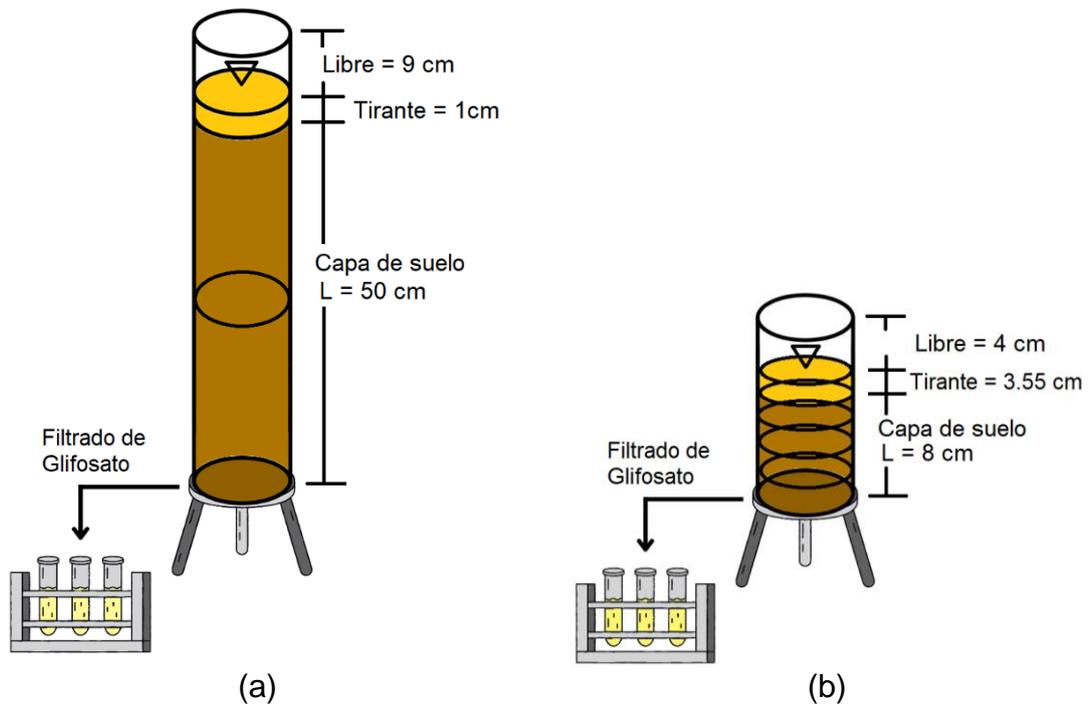


Figura 9. Diagrama del experimento en la columna de suelo: (a) C1 y (b) C2.

Estas columnas recibieron una aplicación de herbicida (dosis de 40.33 g/L de glifosato). Siguiendo el procedimiento descrito por Chávez (2010), se utilizaron cargas de agua constante y variable durante las pruebas; para la carga constante se mantuvo el volumen de agua con el que cada suelo obtenía la saturación (lámina máxima) hallada a partir de la densidad aparente trabajada en la columna y la humedad inicial del suelo previa a la prueba (determinada en laboratorio), en donde la lámina de infiltración (carga) se restauró cada 0.5 cm con la solución de glifosato aplicándola hasta sumar la lámina máxima para cada suelo, en donde se registraron los tiempos hasta que se produjo la primera gota de lixiviado. A partir de este punto se consideró carga variable y se midieron los

tiempos y el volumen de lixiviado obtenido cada que la carga disminuía en 0.5 cm.

Al finalizar la prueba de infiltración, se seccionaron las columnas para extraer las muestras de suelo en los horizontes y analizar la concentración de glifosato retenido a diferentes profundidades, así como en el lixiviado obtenido en cada tiempo. Estas pruebas se realizaron tres veces en cada columna con el fin de estandarizar el método y obtener resultados más certeros.

5. Evaluación de la vulnerabilidad de los suelos agrícolas ante la acción del glifosato

Una vez optimizado el modelo de transporte de solutos en cada suelo analizado, se procedió a aplicar escenarios de simulación y así poder evaluar su comportamiento y predecir posibles rutas de dicho contaminante. Estos escenarios incluyen la aplicación del herbicida hasta tiempos específicos, tomando como referencia las investigaciones de Su et al. (2024). Los escenarios planteados se evidencian en la **Tabla 4**.

Tabla 4. Escenarios de simulación ejecutados.

	Escenario	Cambio
N° 1	Continuidad en la aplicación de glifosato	Este escenario simula o representa la aplicación de glifosato continuamente en ambos casos de estudio luego de terminada la prueba, esto con el fin de evaluar el comportamiento del suelo y su vulnerabilidad dada una aplicación más prolongada del herbicida.
N° 2	Aplicación de glifosato hasta cierto tiempo	Este escenario incluye la aplicación de la misma concentración de glifosato utilizada en la prueba, pero sólo hasta cierto tiempo, a partir de ahí se aplica sólo agua, simulando el escenario en el cual se suministre glifosato y luego agua para lavar el suelo y disminuir la concentración en la capa superficial de este.

6. Análisis estadísticos

En la modelación numérica, se llevaron a cabo las pruebas de bondad de ajuste para verificar la concordancia entre los datos simulados por el modelo y los datos medidos durante la fase experimental en cada caso, para ello se utilizó la *Root Mean Squared Error* - RMSE.

La RMSE determina el error entre dos conjuntos de datos (Chai y Draxler 2014), y se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$RMSE = \sqrt{\sum_{i=1}^N \frac{(\phi_i - \phi_{iobs})^2}{N}} \quad (6.70)$$

donde ϕ_i representa el valor estimado para la celda i , ϕ_{iobs} es el valor medido para la celda i , N es el total de datos analizados. El RMSE nunca es negativo, y un valor igual a cero indicaría que el ajuste a los datos es perfecto. En la **Tabla 5** se aprecian los criterios de evaluación para este parámetro.

Tabla 5. Criterios para la evaluación del RMSE.

Clasificación	Interpretación de la eficiencia del modelo
Muy bueno	RMSE < 0.7
Bueno	0.7 < RMSE < 1.2
Aceptable	1.2 < RMSE < 2.2
Insatisfactorio	RMSE ≥ 2.2

Adaptado de: Ritter y Muñoz-Carpena (2013).

VII. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

1. Características de los suelos agrícolas

El suelo analizado correspondiente a C1 resultó con una clase textural dentro de la clasificación de Arcillo Limoso, mientras que en el C2 se identificó la clase textural de Franco Limoso (**Figura 10**). Dados los factores de formación, especialmente en lo relacionado con la geología, al encontrarse en llanuras aluviales y provenir de sedimentos del Cuaternario (Concyteq, 2002; IDEAM, 2015), estos suelos tienden a predominar las partículas finas y medias, especialmente arcillas y limos, lo que se ve reflejado en la cantidad de limo que en ambos casos supera el 50 %.

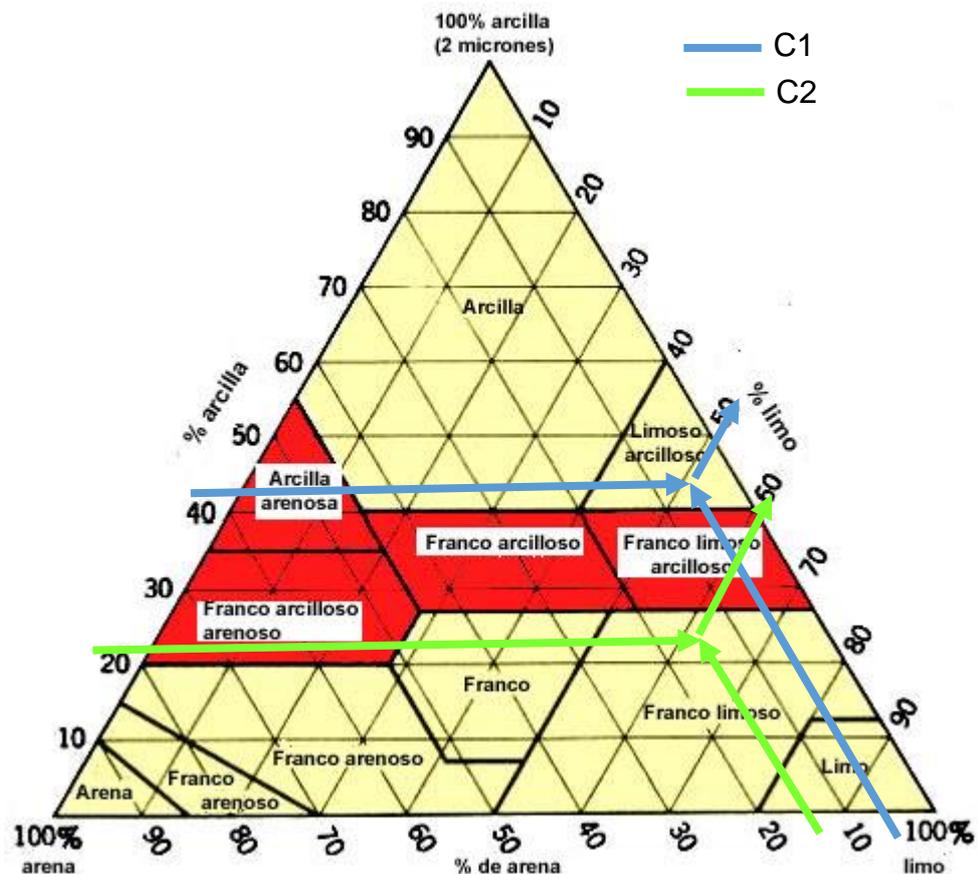


Figura 10. Texturas encontradas en cada caso.

En la **Figura 10** también es posible observar que los porcentajes de arcilla tienen un comportamiento particular en los suelos analizados, ya que C1 posee aproximadamente el doble de arcilla que C2, mientras que C2 casi duplica el

contenido de arena de C1. Estos resultados dan un indicio del comportamiento que pudiera tener la transferencia de agua y el transporte de solutos en cada suelo, ya que al ser los poros los sitios por donde se mueve el agua, y ser la textura uno de los factores condicionantes de la porosidad, entonces es posible inferir que en los dos suelos analizados hay predominancia de mesoporosidad, mientras que la microporosidad es más pronunciada en C1 (FAO, 2014).

Lo anterior puede corroborarse con los resultados de densidad real y aparente mostrados en la **Figura 11**, ya que para C1 se presentó una densidad aparente menor que en C2, debido a que los espacios vacíos en el suelo tienden a ser más reducidos dada la alta presencia de partículas finas (IGAC, 2021).

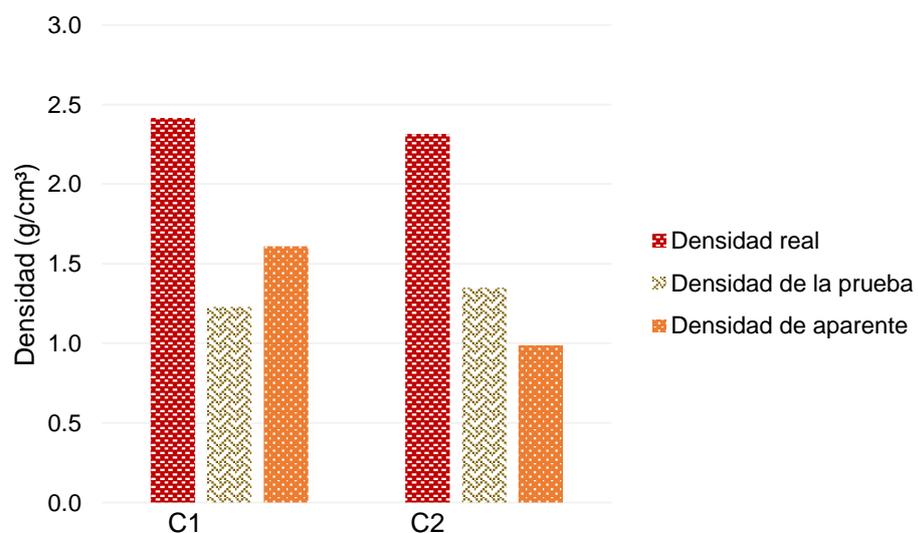


Figura 11. Densidad real y aparente de los suelos estudiados.

La **Figura 12** muestra el contenido de humedad encontrado en las muestras de suelo analizadas, siendo notablemente mayor en C1, lo que puede deberse a las condiciones climáticas del sitio, ya que en esta zona se presenta mayor cantidad de precipitación anual y el nivel freático tiende a ser relativamente superficial. La gráfica mencionada también muestra el contenido de humedad al momento de iniciada la prueba, esto porque en la preparación de las muestras fue necesario someterlas a secado para realizar el respectivo tamizaje, siendo esta la humedad considerada como inicial para el modelo numérico.

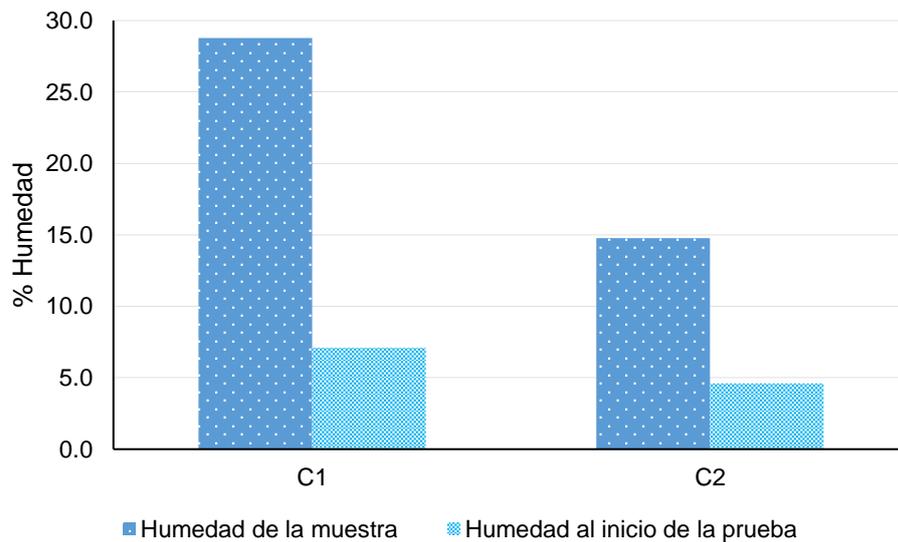


Figura 12. Contenido de humedad en las muestras analizadas.

Con el fin de analizar las características del suelo y entender su posible vulnerabilidad ante la acción del glifosato, se estudiaron algunas características químicas en lo relacionado con el contenido de materia orgánica, carbono orgánico y pH mostrados en la **Figura 13**; en ella se puede apreciar que para los dos suelos se presenta una proporción similar entre los niveles de materia orgánica y carbono orgánico total, siendo menores para C1, lo que puede deberse a la alta tasa de descomposición que tienen los materiales orgánicos debido a las elevadas temperaturas del ambiente, sin embargo, es posible considerar que en todos los suelos analizados se presentaron valores relativamente altos de materiales orgánicos, lo que puede significar un aporte significativo en las propiedades de reacción del suelo haciendo que puedan contrarrestar los efectos provocados por agentes contaminantes como el glifosato (Eduah et al., 2024; Li et al., 2021).

Por otro lado, los valores de pH hallados muestran que C1 clasifica dentro de la categoría neutro, lo que es ideal para la mayoría de las plantas, ya que puede condicionar una cantidad óptima de nutrientes y una actividad microbiana equilibrada, mientras que para C2 se clasificó como ligeramente ácido, siendo este rango aún más ideal para la disponibilidad de nutrientes para las plantas ya que lo hacen de manera más eficiente. En general, estos valores representan condiciones del suelo que pudieran ser óptimas para una salud ambiental que

permita conservar el recurso y reducir el riesgo de degradación (Liao et al., 2023; Shankar & Garkoti, 2024).

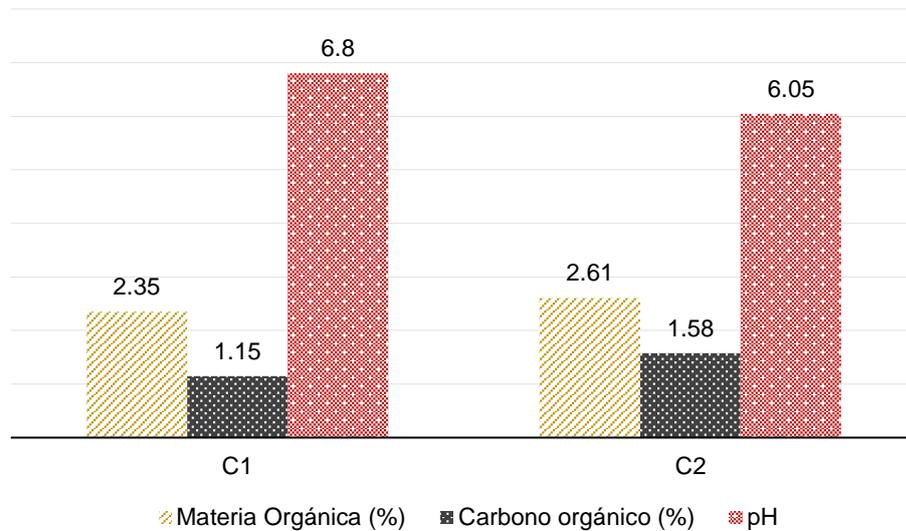


Figura 13. Características químicas analizadas en los suelos.

Los valores de las características fisicoquímicas de los suelos analizados en cada caso se sintetizan en la **Tabla 6**.

Tabla 6. Resumen de los parámetros fisicoquímicos determinados en los suelos.

Parámetro	Valores	
	C1	C2
Arena (%)	6.05	15.23
Limo (%)	51.35	61.43
Arcilla (%)	42.5	23.34
Densidad real (g/cm ³)	2.415	2.316
Densidad de la prueba (g/cm ³)	1.230	1.350
Densidad aparente (g/cm ³)	1.61	0.99
Materia Orgánica (%)	2.35	2.61
Carbono Orgánico Total (%)	1.15	1.58
pH	6.8	6.05
Humedad (%)	28.77	14.77
Humedad de la prueba (%)	7.1	4.61

1.1. Concentración inicial de glifosato en los suelos

Por último, se evaluaron las concentraciones de glifosato presentes en los suelos de los dos casos de estudio, esto con el fin de obtener un valor inicial del contaminante de interés en el suelo, los resultados se presentan en la **Figura 14**, en la cual es posible apreciar que las concentraciones en C2 son significativamente mayores que las encontradas en C1, ésto puede deberse a que C1 se encuentra localizado en una parcela agrícola experimental perteneciente a la Facultad de Ciencias Agrícolas de la Universidad de Córdoba, ya que su uso y/o explotación no es intensivo sino esporádico, contrario a lo que ocurre en C2, que se trata de una zona en la que a través de los años se ha practicado la agricultura y con esta el uso intensivo de herbicidas .

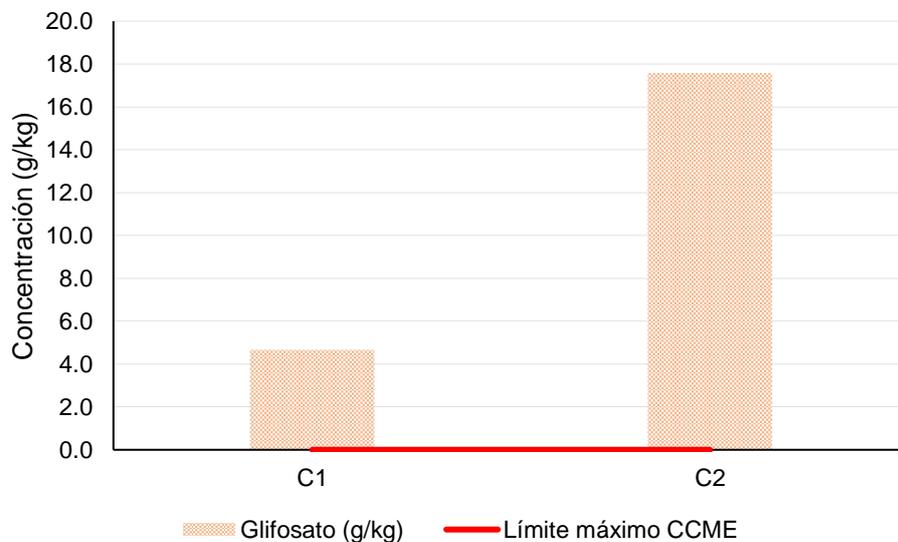


Figura 14. Concentración de glifosato en los suelos estudiados.

En todo caso, para los dos casos analizados se presentaron concentraciones de glifosato excesivamente altas si se les compara con los límites máximos de pesticidas propuestos por el *Canadian Council of Ministers of the Environment* (CCME), el cual establece que para suelos de uso agrícola y residencial los valores de glifosato no deben sobrepasar los 0.0007 g/kg para que no represente riesgo al medio ambiente y la salud humana (Ferreira et al., 2023). Sin embargo los valores encontrados en la presente investigación superan este límite suponiendo entonces contaminación por glifosato en el suelo, estos valores

concuerdan con los resultados encontrados en suelos agrícolas por Gomasasca et al. (2024); Mencaroni et al. (2023) y Nahar & Niven (2023).

1.2. Curva Granulométrica de los suelos estudiados

Los resultados obtenidos para la granulometría de cada suelo estudiado se utilizaron para optimizar los modelos de poro señalados en las ecuaciones (6.6). (6.7) y (6.8), siendo para C1 el modelo de poro grande el que mejor se ajustó, dada su menor RMSE (**Tabla 7**), mientras que C2 se ajustó mejor al modelo de poro neutro; aunque todos los modelos tuvieron un ajuste muy bueno según los criterios de la **Tabla 5**, se eligió aquel cuyo valor fuera más cercano a cero. La **Figura 15** y **Figura 16** muestran las curvas obtenidas para los casos C1 y C2, respectivamente con los ajustes de cada modelo de poro realizado.

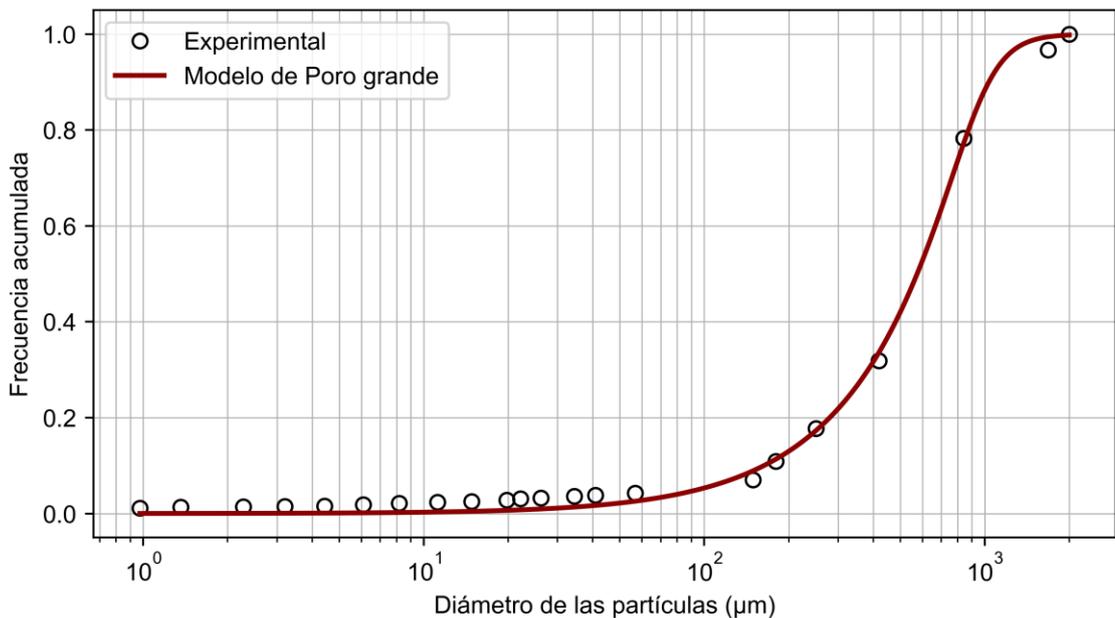


Figura 15. Curva granulométrica ajustada con los modelos de poro para C1.

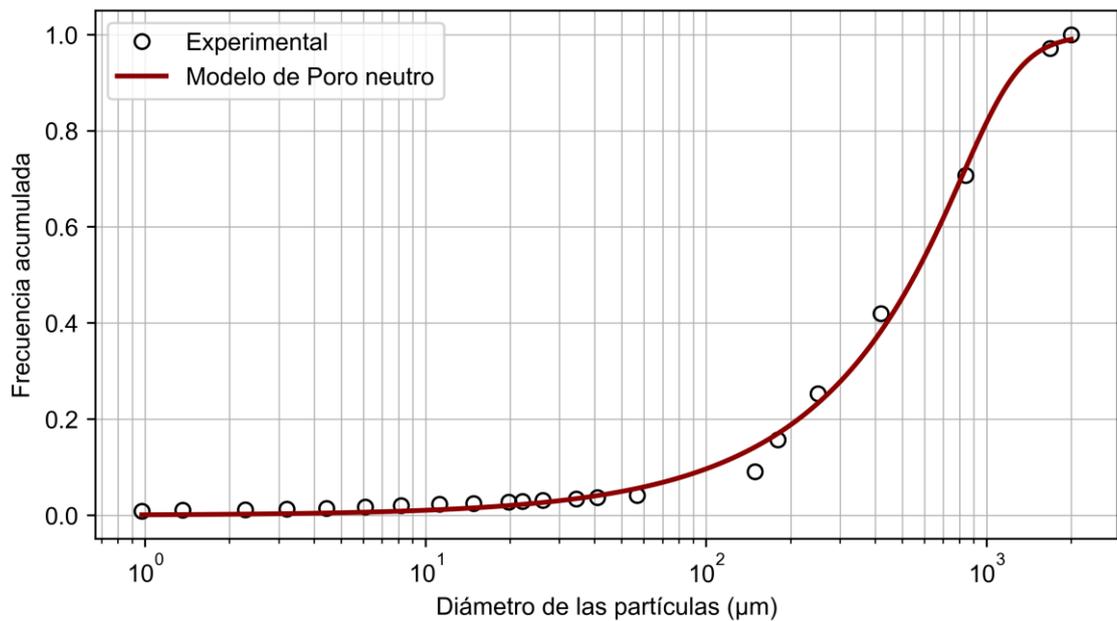


Figura 16. Curva granulométrica ajustada con los modelos de poro para C2.

Tabla 7. RMSE obtenido por los modelos de poro.

Caso	RMSE del Modelo		
	Poro grande	Poro neutro	Media geométrica
C1	0.01751	0.01768	0.02064
C2	0.01691	0.01660	0.01763

Así, de los modelos que mejor se ajustaron, se calcularon los parámetros correspondientes al diámetro característico de partícula (D_d) y los parámetros empíricos de forma m y n , utilizados posteriormente para la estimación de las curvas de retención de humedad y de conductividad hidráulica en cada suelo objeto de estudio. Los valores de estos parámetros se presentan en la **Tabla 8**.

Tabla 8. Valores de los parámetros obtenidos de la curva granulométrica.

Caso	Parámetros		
	D_d	m	n
C1	979.8897	0.19724	3.8826
C2	1136.6942	0.18609	3.1784

2. Características hidrodinámicas de los suelos: Curvas de Retención de Humedad y Conductividad Hidráulica

Para la determinación de las características hidrodinámicas del suelo se utilizaron los valores de densidad aparente (ρ_t) de cada suelo, para C1 se utilizó un valor de 1.23 g/cm³, mientras que para C2 fue de 1.35 g/cm³, la porosidad (Φ) fue calculada mediante la Ecuación (6.4) y la dimensión fractal relativa de cada suelo (s) se obtuvo a partir de la optimización de Brentq de la Ecuación (6.5). Así, los valores utilizados se muestran en la **Tabla 9**.

Tabla 9. Parámetros físicos usados para la estimación de las características hidrodinámicas de los suelos.

Caso	Parámetros		
	ρ_t (g/cm ³)	Φ	s
C1	1.23	0.53584	0.70189
C2	1.35	0.49057	0.69225

2.1. Pruebas de infiltración

Para C1 se aplicó una masa de suelo correspondiente a 5586.52 g, que equivale a un volumen de 3469.89 cm³ con el fin de completar los 50 cm de columna de suelo, se mantuvo una carga constante de 1 cm de solución de glifosato (40.33 g/L) correspondiente a 69.4 cm³, el tiempo que tardó en caer la primera gota de lixiviado fue de 109:46:28 h, lo equivalente a 381,600 segundos en los cuales de infiltraron 1619.74 mL de solución; los resultados de esta prueba y su optimización de observan en la **Figura 17**.

Por su parte, para los puntos C2 se utilizó una masa de suelo de 750.79 g, esto para completar los 8 cm de columna de suelo, se mantuvo carga constante de 3.55 cm de la solución de glifosato a la misma concentración que para C1, mientras el suelo se saturaba y se generaba la primera gota de lixiviado, de ahí en adelante se utilizó carga variable. El tiempo en caer la primera gota de lixiviado para C2 fue de 5.77 horas, en los cuales se infiltraron 211.66 mL de solución de glifosato (**Figura 18**), lo que en cierta medida concuerda con los resultados experimentales de Rivero (2017).

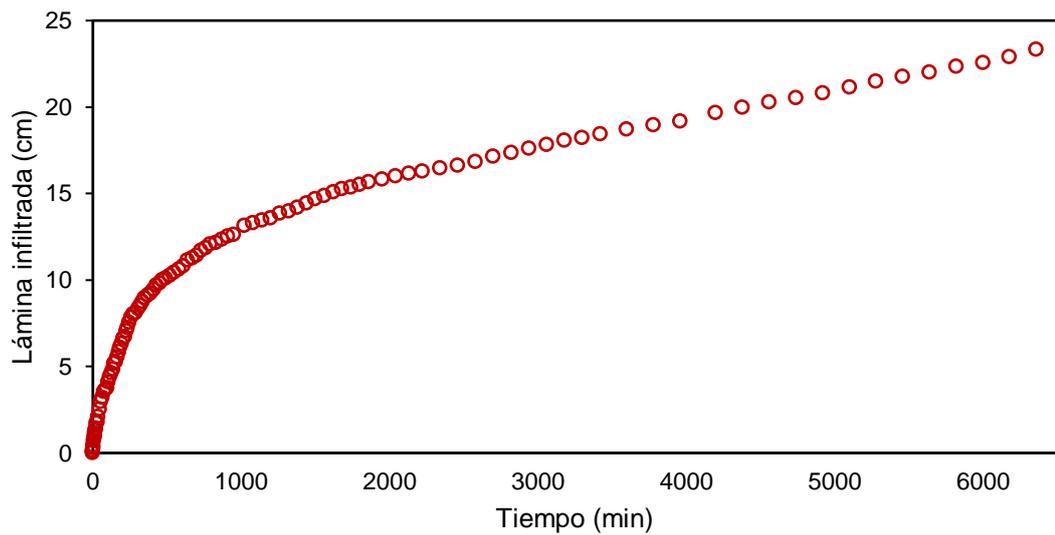


Figura 17. Lámina infiltrada acumulada de C1.

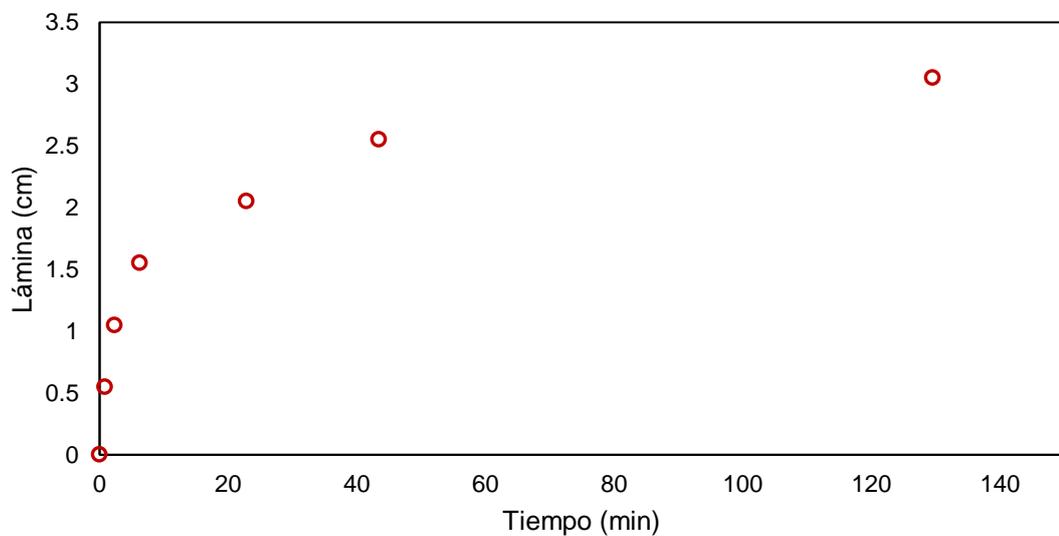


Figura 18. Lámina infiltrada acumulada de C2.

El comportamiento de la lámina infiltrada en los dos suelos analizados muestra que, en condiciones de no saturación (al inicio de la prueba), se presenta una notable rapidez en la infiltración, dado el volumen infiltrado en el corto tiempo (**Figura 17** y **Figura 18**), sin embargo, esta rapidez comienza a mermar en cuanto el suelo se va saturando; la infiltración se hace más lenta y por lo tanto es posible apreciar que la lámina infiltrada tiende a estabilizarse en ciertos valores a medida que pasa el tiempo. En las gráficas citadas también se observa

que el intervalo de tiempo de aplicación de la solución aumenta a medida que el suelo se va saturando.

Por otro lado, es notoria la diferencia que existe entre los valores de lámina infiltrada así como de los tiempos de infiltración en los dos casos; en C1 se debe a diferentes factores, uno de ellos es la longitud de la columna de suelo, al ser esta de 50 cm, la llegada del agua hasta el fondo de la columna resulta ser mucho más tardada, sin embargo otro factor que influye en gran medida es la textura de este suelo, ya que su contenido de arcilla es relativamente elevado si se le compara con el resto de puntos analizados, siendo este material, el principal condicionante de microporosidad, sumado a esto, la densidad aparente manejada para este suelo indica una alta unión entre las partículas, por lo que los espacios por donde se pudiera mover el agua resultan ser más tortuosos (Sun et al., 2022).

El efecto de la textura y de la cantidad de arcilla y por lo tanto la porosidad de los suelos sobre la infiltración y el movimiento de agua en este, se pudo notar en gran medida en los resultados del experimento para el suelo de C2, ya que presentó infiltración mucho más retardada, que tomó casi cinco horas más en saturarse y liberar la primera gota de lixiviado; estos resultados se pueden equiparar a los obtenidos por Stuurop et al. (2022) en donde la cantidad de partículas finas y medias influyó notablemente en el transporte y velocidad intersticial del agua en el suelo.

2.2. Ajuste de los parámetros para la optimización de la lámina infiltrada

Al obtener las características hidrodinámicas de los suelos mediante métodos inversos, se realizó el ajuste de los parámetros para obtener la lámina infiltrada simulada que se ajustara a la lámina obtenida en cada uno de los puntos de interés. Para esto fue necesario los datos de curva granulométrica de cada suelo, las densidades aparentes y la humedad del suelo en cada prueba realizada. La optimización permitió obtener los valores de conductividad hidráulica saturada (K_s) y presión característica del suelo (ψ_d), para ello se utilizó el modelo de optimización de parámetros para la ecuación de Richards elaborado por Chávez

(2010). Las gráficas de lámina medida (puntos rojos) versus lámina calculada (línea azul) para C1 y C2 se observan en la **Figura 19** y **Figura 20**, respectivamente; mientras que los valores de K_s , ψ_d y la raíz del error medio cuadrático obtenidos en cada optimización se representan en la **Tabla 10**, en donde es posible contemplar que los ajustes encajan dentro de la categoría de muy bueno.

Tabla 10. Valores optimizados de K_s , ψ_d y su error para cada caso.

Caso	Parámetros		
	K_s (cm/h)	ψ_d (cm)	RMSE
C1	1.3002	-54.6826	0.53566
C2	1.4689	-12.4318	0.45953

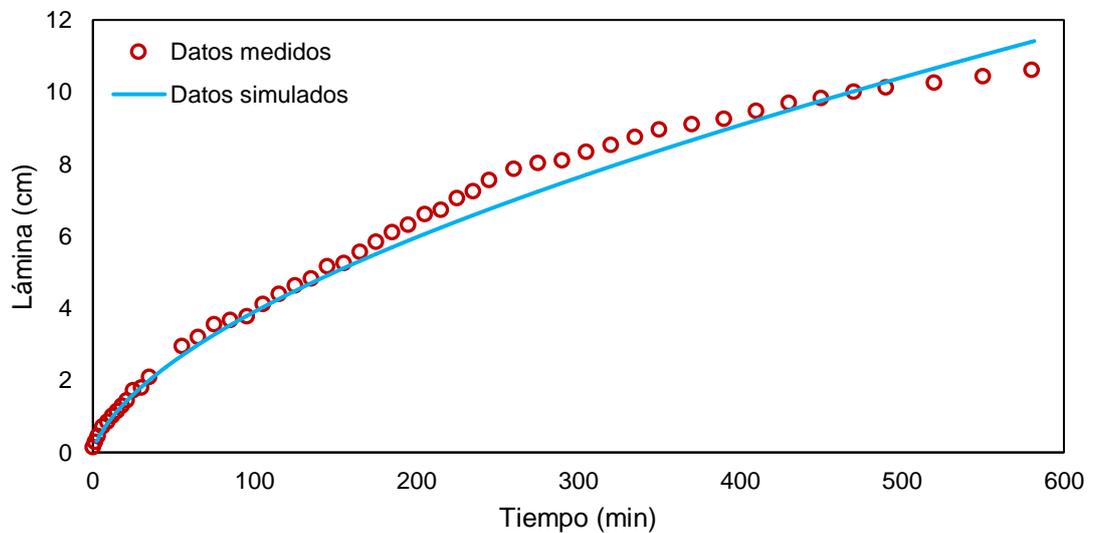


Figura 19. Ajuste de parámetros para la ecuación de Richards en C1.

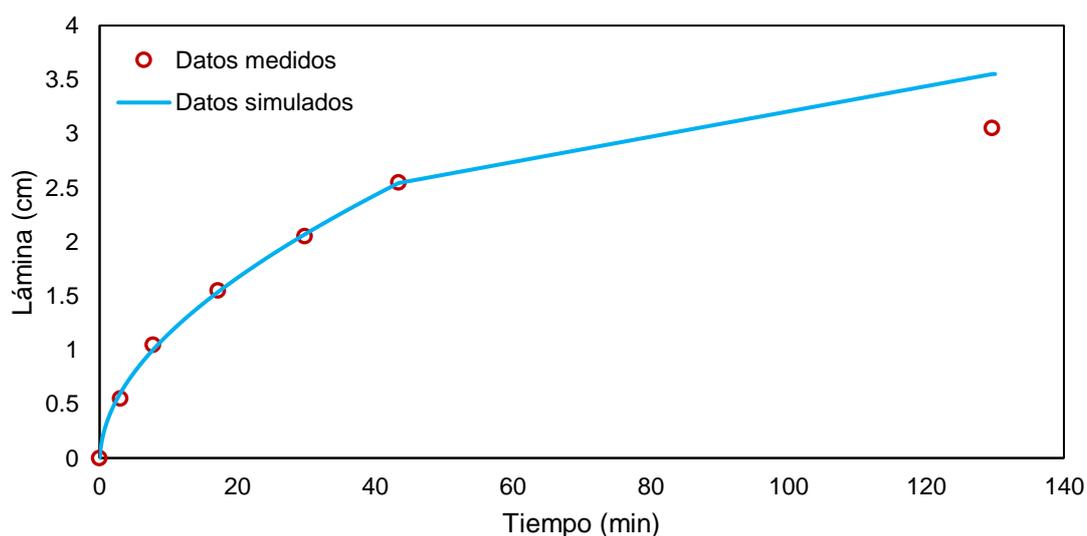


Figura 20. Ajuste de parámetros para la ecuación de Richards en C2.

2.3. Curva de Retención de Humedad y de Conductividad Hidráulica

Las pruebas de infiltración de glifosato en cada tipo de suelo se utilizaron para obtener, de manera inversa, las curvas de retención de humedad y de conductividad hidráulica, es decir, los valores de lámina infiltrada calculados se optimizaron con los obtenidos en las pruebas utilizando el método de Levenberg-Marquardt, que se usa principalmente para ajustar funciones modelo a datos (Gavin, 2019). Siguiendo las características de las columnas de suelo en el experimento, se definió el dominio espacial y temporal del modelo y su discretización (**Tabla 11**), las condiciones iniciales y de frontera superior (tipo Dirichlet, que se utilizó ya que se conocía el valor de una variable independiente de la ecuación diferencial para todo el tiempo, en la superficie del suelo) e inferior (tipo Neumann, ya que se conocía el valor del flujo a través de la frontera para todo el tiempo) (**Tabla 12**) (Kim et al., 2020).

Tabla 11. Valores usados en la discretización espacial y temporal del modelo.

Caso	Dominio espacial			Dominio temporal		
	L	Δz	γ_z	t	Δt	ω
C1	50	0.07	0.5	381,600	0.7	0.9
C2	8	0.001		523,598.23	0.01	

Las unidades de espacio son centímetros y de tiempo segundos.

Tabla 12. Condiciones iniciales y de frontera utilizadas en cada punto.

Caso	Condiciones iniciales	Condiciones de frontera		
	θ_{ini}	Frontera superior:		Frontera inferior: Neumann
		Carga constante (Dirichlet)	Carga variable (Neumann)	
C1	0.0710	1.00	NA	NA
C2	0.0461	3.55	Ecuación (6.11)	Ecuación (6.13)

La humedad se presenta en cm^3/cm^3 y la carga superficial en cm.

Así, los valores de ψ_d de la ecuación (6.2) se optimizaron obteniendo así la curva de retención de humedad para cada suelo analizado con el modelo de van Genuchten, como se muestra en la **Figura 21**. Estas curvas muestran θ del suelo en función del potencial matricial o presión de succión de este; la curva indica que ante altos contenidos de humedad el agua se localiza en los poros más grandes del suelo y puede drenar fácilmente, mientras que, cuando el contenido de humedad es bajo la succión es alta y el agua es retenida por el suelo, especialmente en los microporos, por lo tanto, es posible apreciar que para C2 se presentan valores relativamente altos de succión en comparación con C1, siendo menores los de este último. Por su parte, es posible apreciar que en C2 para contenidos de humedad muy bajos la presión de succión tiene una tendencia al aumento, con una pendiente suave, indicando una mayor proporción de poros grandes, mientras que para C1 se observa que en la región baja de humedad la pendiente es empinada, lo que indica mayor proporción de microporos (Latorre & Moret-Fernández, 2019; Sheikhabglou et al., 2021).

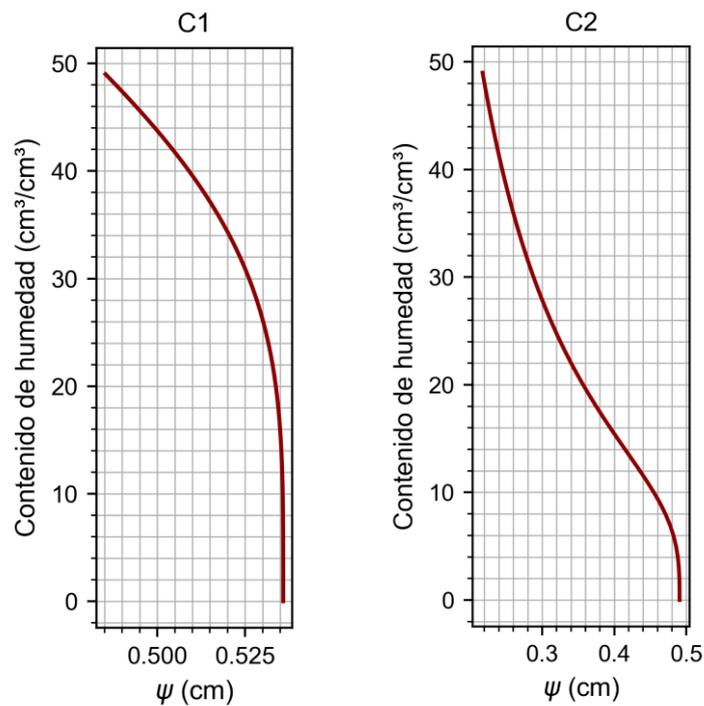


Figura 21. Curva de retención de humedad para los suelos estudiados.

Las curvas de conductividad hidráulica obtenidas para cada caso de estudio se evidencian en la **Figura 22**, en donde se aprecia un comportamiento similar en ambos suelos, ya que los valores mayores de K se dan cuando el contenido de humedad es mayor, esto se debe a que los poros grandes están llenos de agua y propician un flujo fácil, caso contrario a lo que ocurre en la región baja de humedad, en donde la conductividad hidráulica también es extremadamente baja y por lo tanto la fuerza de atracción es alta, haciendo que el agua que se encuentra en los microporos sea retenida (Hu et al., 2021).

Esta relación entre la presión de succión y la conductividad hidráulica se puede observar, para los dos casos estudiados, en la **Figura 23**; siendo notorio cómo la conductividad disminuye drásticamente cuando el suelo se encuentra atrayendo el agua en los microporos y es difícil que el agua pueda atravesar el suelo. Hay un efecto notable en C2, donde la conductividad es significativamente baja cuando la presión de succión no es tan alta, lo que indica que existe una rápida disminución en la conductividad con pequeños aumentos en la succión, fenómeno que ocurre típicamente en suelos con poros grandes (S. Wang et al., 2021).

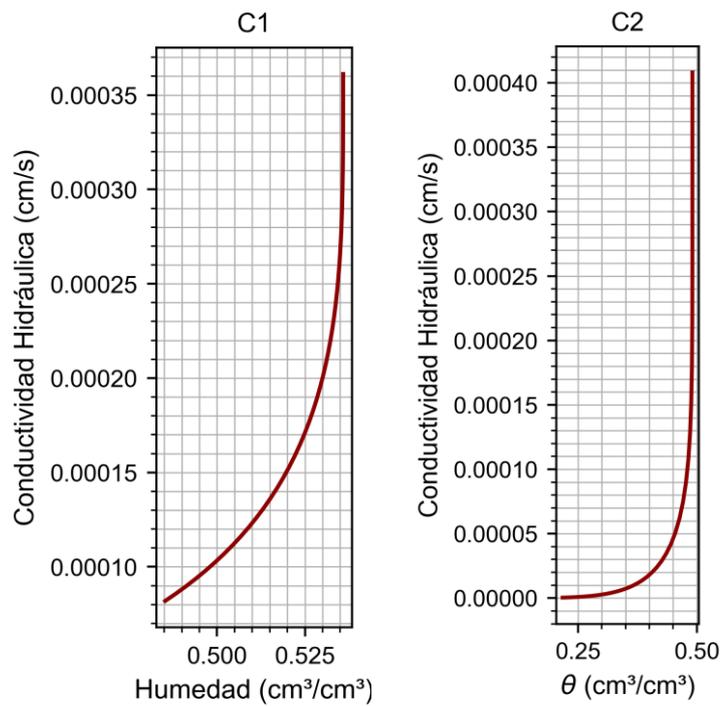


Figura 22. Curva de conductividad hidráulica para los suelos estudiados.

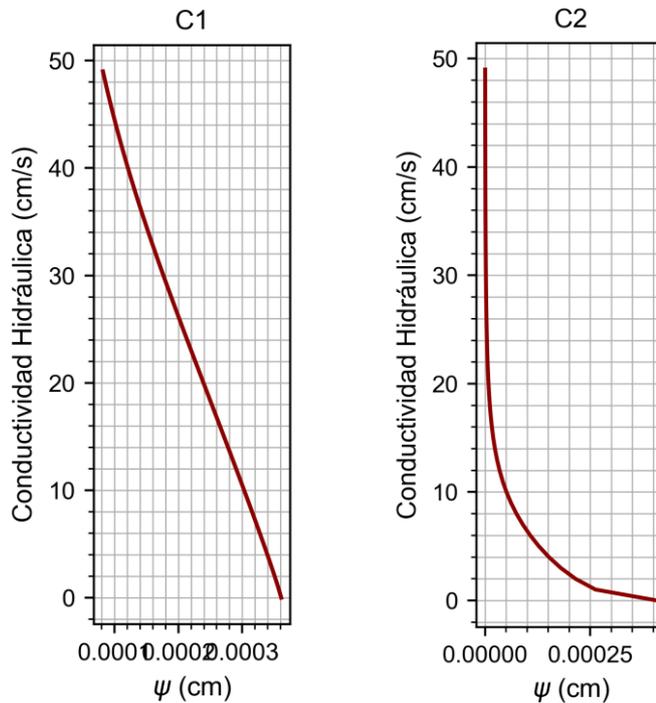


Figura 23. Curva de conductividad hidráulica en función de la presión de succión para los suelos estudiados.

La capacidad específica hace referencia a la pendiente de la curva de retención de humedad, indicando cómo cambia la humedad en el suelo en función de la presión de succión; para los dos casos analizados (**Figura 24**) se aprecia que

cuando la succión es baja, pequeños cambios en esta ocasionarían grandes variaciones en el contenido de agua, por lo que la capacidad específica es alta, este fenómeno ocurre también cuando la succión es muy alta, alcanzando valores de capacidad específica muy cercanos a los que se presentan cuando la succión es baja (Najdi et al., 2023).

En la zona donde la capacidad específica disminuye hay una succión intermedia, esto porque los poros grandes se han vaciado y la succión afecta principalmente a poros medianos y pequeños; cuando la succión es baja C2 tiene una pendiente más pronunciada que C1, lo que indica que el suelo tiene una gran capacidad para almacenar agua, liberándola rápidamente con pequeños aumentos en la succión (Pečan et al., 2023).

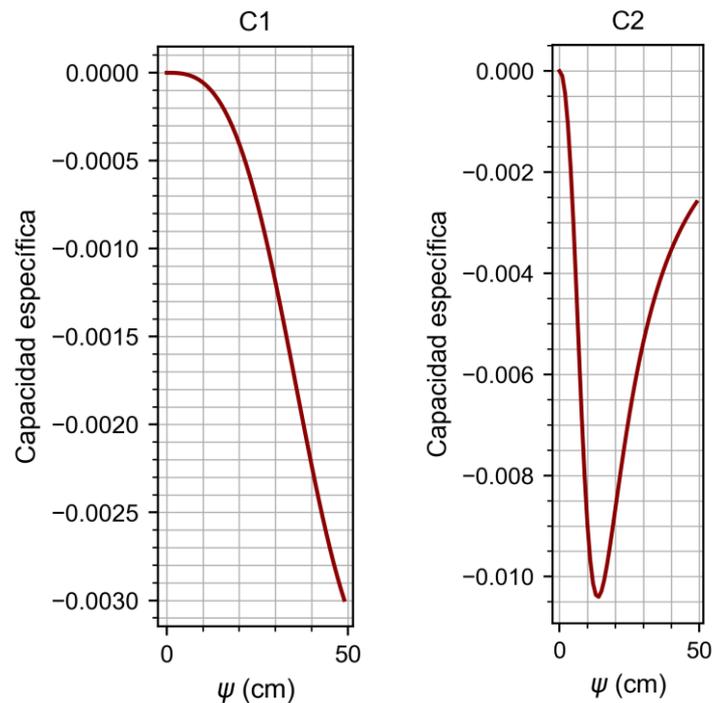


Figura 24. Curvas de capacidad específica del suelo en función de la presión de succión.

2.4. Perfil de humedad del suelo: Modelación de la transferencia de agua

Luego de resolver numéricamente la ecuación de Richards para los dos suelos analizados, se obtuvo el perfil de humedad de cada uno (C1: **Figura 25** y C2: **Figura 26**), estas gráficas indican el contenido de humedad para diferentes

tiempos en función de la longitud (profundidad) de la columna analizada, puede observarse cómo en las capas superiores de los suelos se obtiene un alto contenido de agua, debido a la carga de agua aplicada en los suelos. A medida que se profundiza el contenido de agua disminuye, es decir, el agua se infiltra hacia capas inferiores y se redistribuye en el perfil de suelo, llegando hacia las zonas más profundas en donde el contenido de agua tiende a estabilizarse, reflejando la capacidad que posee el suelo para retener agua mediante fuerzas capilares, como lo indican en su investigación Aryeni & Ginting (2022).

Los resultados muestran que, para C1 se alcanza la saturación del suelo después de las 103 h de iniciada la prueba, lo que concuerda en gran medida con las pruebas de infiltración llevadas a cabo, a partir de este tiempo el agua se empieza a acumular hasta liberar la primera gota de lixiviado. Por su parte, para C2, la saturación ocurre pasadas las 5 h. Estos valores concuerdan en gran medida con los resultados del ensayo de infiltración, lo que indica que el modelo de transferencia de agua de Richards es capaz de representar las condiciones de flujo en los suelos objeto de estudio.

Los valores mostrados en el perfil de humedad para C2 muestran un comportamiento similar al de C1, en donde la saturación o el contenido de humedad máxima se da mucho después de iniciada la prueba (**Figura 26**), por lo que es posible inferir que el modelo de Richards se ajustó muy bien a los dos puntos estudiados y que permite describir las condiciones de transferencia de agua en los suelos y por lo tanto dar pie a la descripción del transporte de glifosato, como se muestra en la siguiente sección.

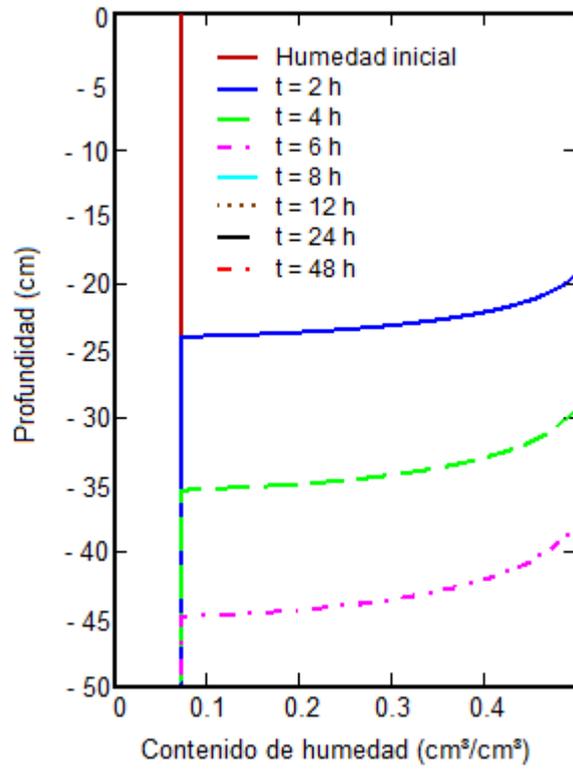


Figura 25. Perfil de humedad del suelo para C1.

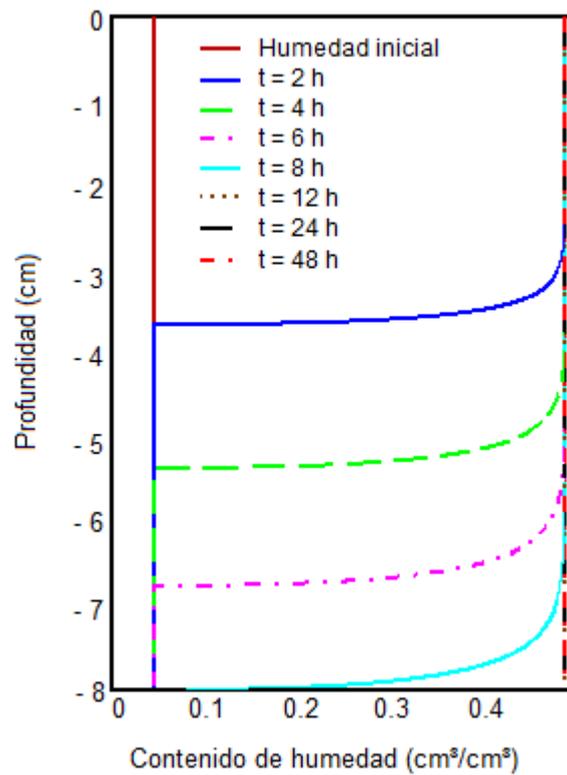


Figura 26. Perfil de humedad del suelo para C2.

3. Coeficiente de dispersividad del glifosato en los suelos agrícolas: Modelación del transporte de solutos

3.1. Concentración de glifosato a diferentes profundidades y en lixiviados.

3.1.1. Análisis de glifosato en el suelo

A partir de la prueba de infiltración en la que se aplicó una solución de glifosato en los dos suelos objeto de estudio, se obtuvieron las concentraciones de dicho contaminante a diferentes profundidades, esto seccionando la columna utilizada para la prueba y realizando el respectivo análisis. Para C1 se tomaron dos muestras de suelo, una a los 12.5 cm y otra a los 37.5 cm de profundidad, mientras que para C2 se tomaron muestras a 1, 3, 5 y 7 cm de profundidad; los resultados de las concentraciones obtenidas para cada suelo se evidencian en la **Tabla 13**.

Tabla 13. Concentración de glifosato a diferentes profundidades para las columnas de suelo estudiadas.

C1		Prof. (cm)	C2
Prof. (cm)	Concentración (g/kg)		Concentración (g/kg)
12.5	21.31	1	54.09
		3	62.76
37.5	5.64	5	49.13
		7	44.15

Es posible apreciar que los valores de glifosato obtenidos en C1 son significativamente menores a los que resultaron para C2, uno de los factores que pudiera explicar este fenómeno está relacionado con el espesor de la capa de suelo con la que se trabajó en C1, ya que al ser 50 cm se tiene mucho más material, y por lo tanto mayor tiempo de contacto con el suelo por lo que le da la posibilidad a este de degradar el contaminante a través de reacciones químicas, como lo indican Bolan et al. (2023); adicionalmente, las distancias entre las lecturas de glifosato en los suelos, son muy distintas, siendo de 25 cm para C1

y de 2 cm para C2, por lo que la concentración se va a notar más cambiante mientras la distancia entre los puntos sea mayor.

Si se tiene en cuenta la concentración inicial de glifosato (antes de la prueba), es posible observar que para C1, el valor hallado en el último horizonte estudiado es relativamente cercano al original encontrado en el suelo (**Figura 27**). Esto no ocurre para C2 (**Figura 28**), en donde las concentraciones de glifosato en la última capa de suelo alcanzan a duplicar el valor inicial, siendo el panorama menos alentador para C2, donde además de tener el valor inicial mayor, la concentración en la última capa también es relativamente alta. Para este último caso es importante resaltar que en la segunda capa de suelo se presentaron las mayores concentraciones de glifosato, sin embargo, a medida que se avanza en profundidad, estos valores van disminuyendo; este comportamiento es comparable con las concentraciones de glifosato y AMPA obtenidas para varios perfiles de suelo por Villarreal et al. (2020), en donde analizan la alta afinidad de las moléculas de glifosato con las partículas de suelo, especialmente la que se da en las capas superiores.

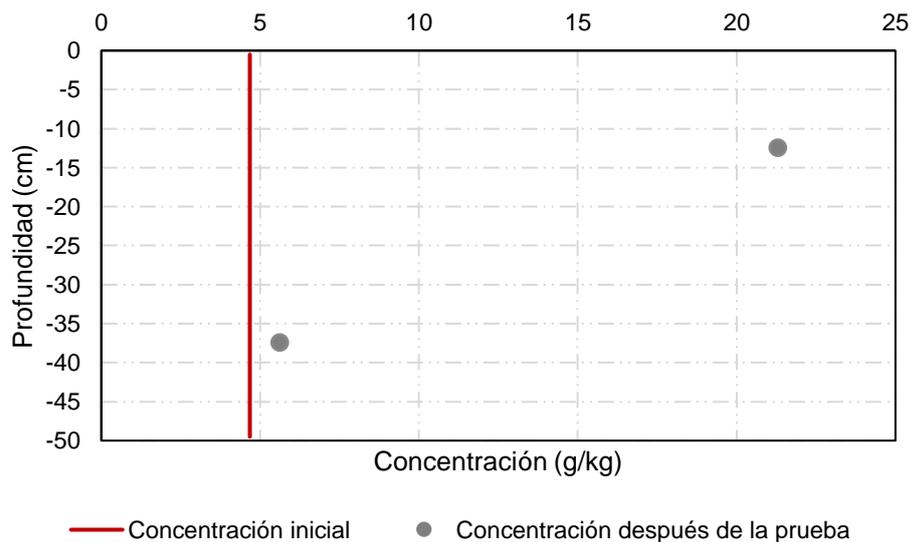


Figura 27. Concentración de glifosato vs. profundidad en C1.

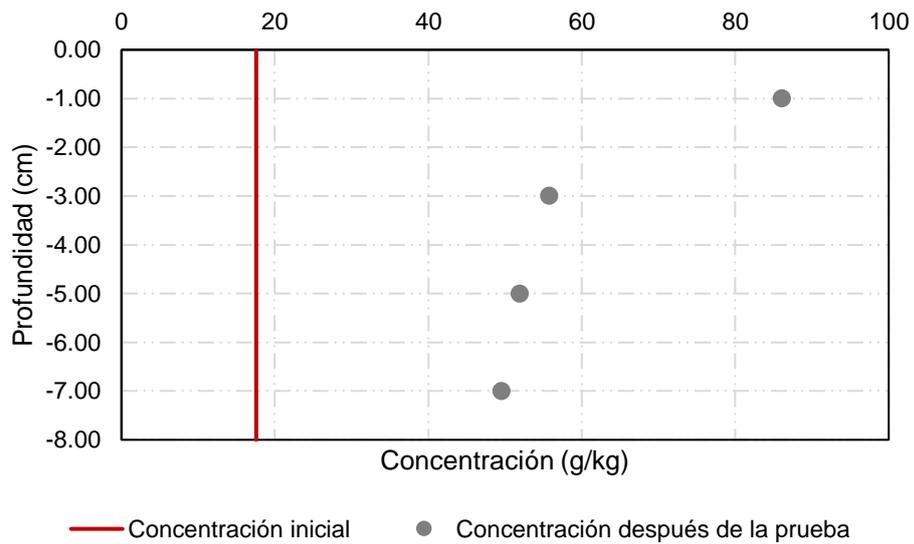


Figura 28. Concentración de glifosato vs. profundidad en C2.

3.1.2. Análisis de glifosato en los lixiviados

Adicionalmente, la concentración en el lixiviado obtenido de C1 mostró un valor de 1.20 g/L, esto indica que, en comparación con la concentración aplicada en la solución, el suelo capturó más del 97 % del glifosato ingresado, lo que puede explicarse por la cantidad de suelo que se manejó en esta prueba, que hace que se dé un tiempo de reacción más prolongado y por lo tanto la degradación de dicho contaminante sea más efectiva, como lo indican también Lei et al. (2018). Para C2 se obtuvo la concentración de lixiviado en diferentes tiempos, como se muestra en la **Figura 29**.

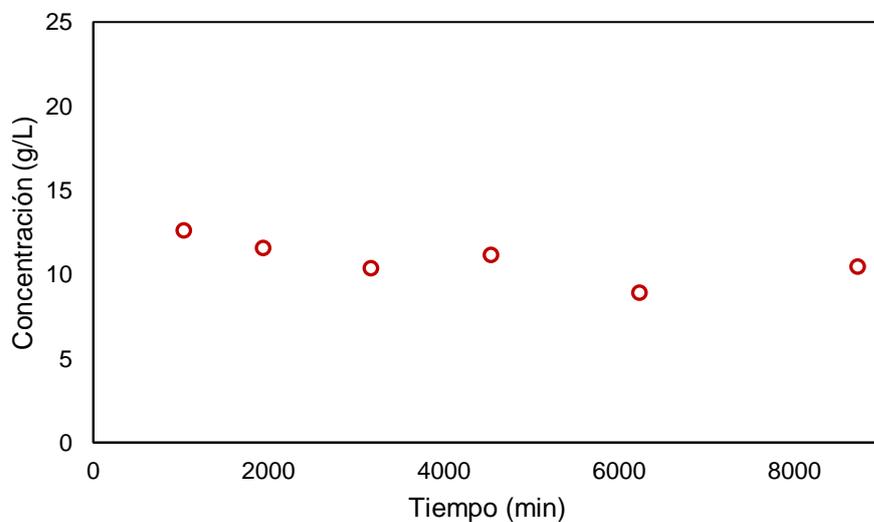


Figura 29. Concentración de lixiviado en el tiempo para C2.

Las concentraciones de glifosato en el lixiviado para C2 muestran un comportamiento particular, en donde se presentaron valores mayores en los primeros tiempos de caída de lixiviado (lo que puede darse por una rápida movilización inicial del glifosato desde el suelo (Gyabaah et al., 2024)) y con tendencia a la disminución hasta las 4.00 horas, luego presenta un pequeño aumento y se mantiene un poco fluctuante en un rango desde los 6900 hasta los 9300 mg/L, lo que supone una retención por parte del suelo. Los valores obtenidos en esta prueba son significativamente mayores al hallado en C1, lo que indica que, dadas las características del suelo, C2 tiende a retener en menor medida la molécula de glifosato (Akpan Usoh et al., 2022).

3.2. Modelación del transporte de glifosato en los suelos

A partir de la optimización de la ecuación de Advección-Dispersión para cada tipo de suelo se obtuvieron los coeficientes de dispersividad del glifosato, usados para modelar el transporte de dicho contaminante en los suelos, los resultados indican que el glifosato en el C1 muestra un valor significativamente más pequeño que en C2 (**Tabla 14**); esto sugiere que las heterogeneidades del suelo, como porosidad y estructura del material en C1, hacen que la dispersión del glifosato sea mucho menor, y por lo tanto su propagación sea más lenta o menos extensa en comparación con un suelo con un coeficiente de dispersividad mayor, como es el caso de C2 donde el contaminante se disemina más rápidamente. Los resultados del coeficiente de dispersividad en los suelos concuerdan con los valores reportados para la dispersividad de una especie de cromo por Rivero (2017).

Tabla 14. Valores del coeficiente de dispersividad.

Caso	Coficiente de dispersividad λ (m ² /s)	RMSE
C1	0.0000027	0.223
C2	0.00002209	12.077

Así, se obtuvieron las gráficas correspondientes al comportamiento del glifosato en C1 y C2, como se muestra en la **Figura 30** y **Figura 31**, respectivamente. Los

valores obtenidos permiten describir el comportamiento de la concentración del glifosato en el perfil de suelo; C1 al tratarse de una columna de mayor longitud, logró disminuir significativamente la concentración de glifosato cuando a medida que se avanzaba en profundidad, acercándose al valor inicial del glifosato hallado en el suelo antes de la prueba. La **Figura 30b** muestra la variación de la concentración del glifosato en el suelo para C1 a lo largo del tiempo, es posible observar que en cortos tiempos (10 h) las concentraciones suelen ser significativamente menores y alcanzan pocas profundidades, panorama que va cambiando a medida que se prolonga la aplicación de glifosato, en donde altas concentraciones alcanzan mayores profundidades, este fenómeno concuerda con el descrito por Gomasasca et al. (2024) y Ferreira et al. (2023).

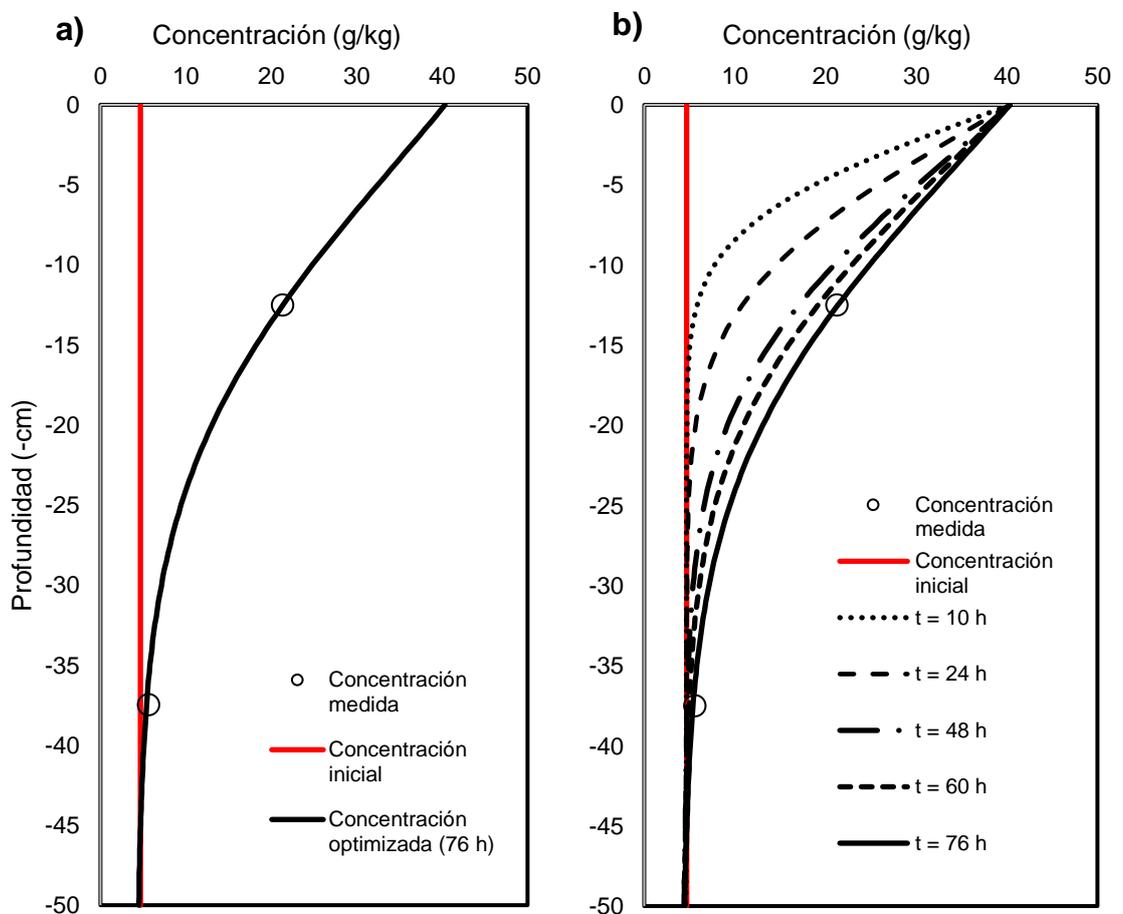


Figura 30. Concentración de glifosato en el perfil del suelo C1: (a) concentración optimizada y (b) comportamiento de la concentración en la prueba a lo largo del tiempo.

En el caso de C2, es posible observar que la concentración va disminuyendo a medida que aumenta la profundidad, sin embargo, esta disminución no es tan significativa y cuando se llega al horizonte final (6 a 8 cm), los valores se encuentran relativamente lejos del valor inicial encontrado en el suelo, esto supone que la degradación o el papel de filtro ambiental de este tipo de suelo es menos efectivo que para el suelo de C1. Esto puede deberse tanto a la degradación del glifosato dada por los compuestos del suelo como la arcilla, materia orgánica y microorganismos como a la dispersividad definida en gran medida por la conductividad hidráulica del suelo y todas las características físicas que la definen; concordando así con los resultados hallados por Morrás et al. (2022) y Villarreal et al. (2020).

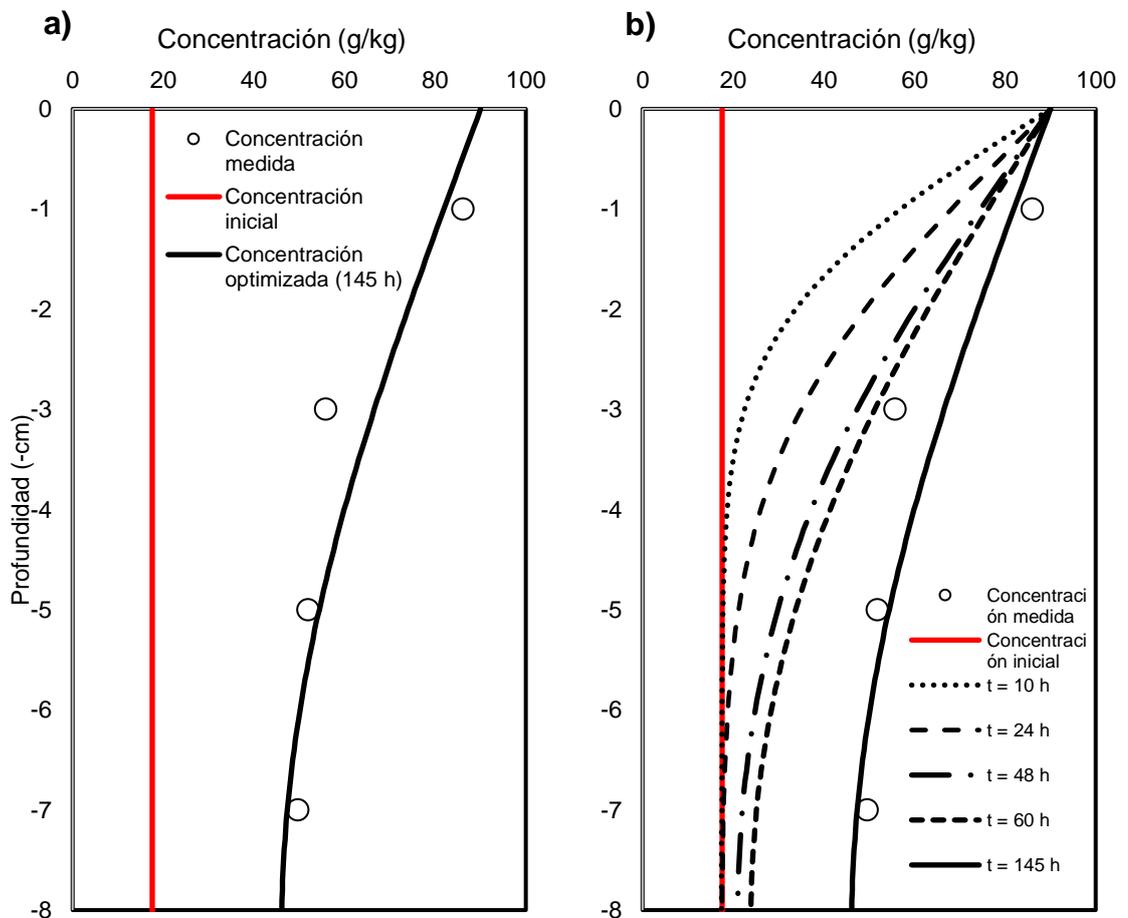


Figura 31. Concentración de glifosato en el perfil del suelo C2. : (a) concentración optimizada y (b) comportamiento de la concentración en la prueba a lo largo del tiempo.

La **Figura 31b** muestra el comportamiento de los valores de concentración de glifosato en el suelo a lo largo del tiempo para el caso 2, es posible apreciar que, a diferencia de lo obtenido en el caso 1, se alcanzan valores significativamente mayores y un comportamiento particular descrito por un aumento en las concentraciones a lo largo del perfil a medida que se aplica la solución de glifosato, alcanzando, en los horizontes más profundos, valores muy alejados de la concentración inicial.

El RMSE de 12.077 obtenido en la simulación de C2 puede parecer elevado, pero es justificable considerando el contexto del problema. El modelo obtenido muestra que las curvas simuladas siguen adecuadamente la tendencia de los datos experimentales, capturando los procesos físicos dominantes, como la advección y dispersión. Dado que el rango de las concentraciones de la prueba alcanza hasta 100 g/kg, este RMSE representa aproximadamente un 12% del rango total, lo que es aceptable en estudios ambientales, especialmente cuando se consideran las incertidumbres inherentes a las mediciones experimentales y la heterogeneidad del suelo. Además, la naturaleza compleja del transporte de contaminantes y las limitaciones experimentales contribuyen a pequeñas discrepancias, sin afectar la capacidad del modelo para describir de manera útil y realista el comportamiento del glifosato (Kuriakose et al., 2009; Willmott & Matsuura, 2005).

4. Evaluación de la vulnerabilidad de los suelos ante la acción del glifosato

4.1. Escenario 1: Continuidad en la aplicación de glifosato

El escenario 1 simuló la continuidad hasta las 1000 horas en la aplicación de glifosato durante la prueba, lo que permitió mostrar que esto implicaría un impacto directo a la dinámica del movimiento y la degradación del contaminante en el suelo, debido a que en ambos casos se alcanzarían concentraciones considerablemente elevadas, significando contaminación del suelo y por lo tanto el riesgo de la llegada de este compuesto a los matos freáticos. Con este escenario se comprobó la influencia del tiempo de contacto que tiene el contaminante con los coloides y cuya interacción define el potencial de

degradación o de filtro ambiental que tiene el suelo ante la acción de ciertos compuestos.

Para este escenario, los resultados indicaron que los valores de glifosato en el suelo aumentarían de manera directa, y que en los horizontes más profundos no se alcanzaría una disminución significativa de las concentraciones; para C1 se alcanzaría una leve disminución de la concentración en el perfil del suelo para el último tiempo (**Figura 32**), sin embargo, para C2 la disminución sería casi nula, es decir que la concentración entrante y saliente de glifosato en la columna sería prácticamente la misma (**Figura 33**), este comportamiento concuerda con el reportado por Su et al. (2024), que comprobaron mediante la simulación de la contaminación de elementos tóxicos en suelo, que los contaminantes muestran una tendencia decreciente con la profundización, pero cuando su aplicación supera la capacidad de asimilación del suelo pueden traer graves consecuencias para el ecosistema.

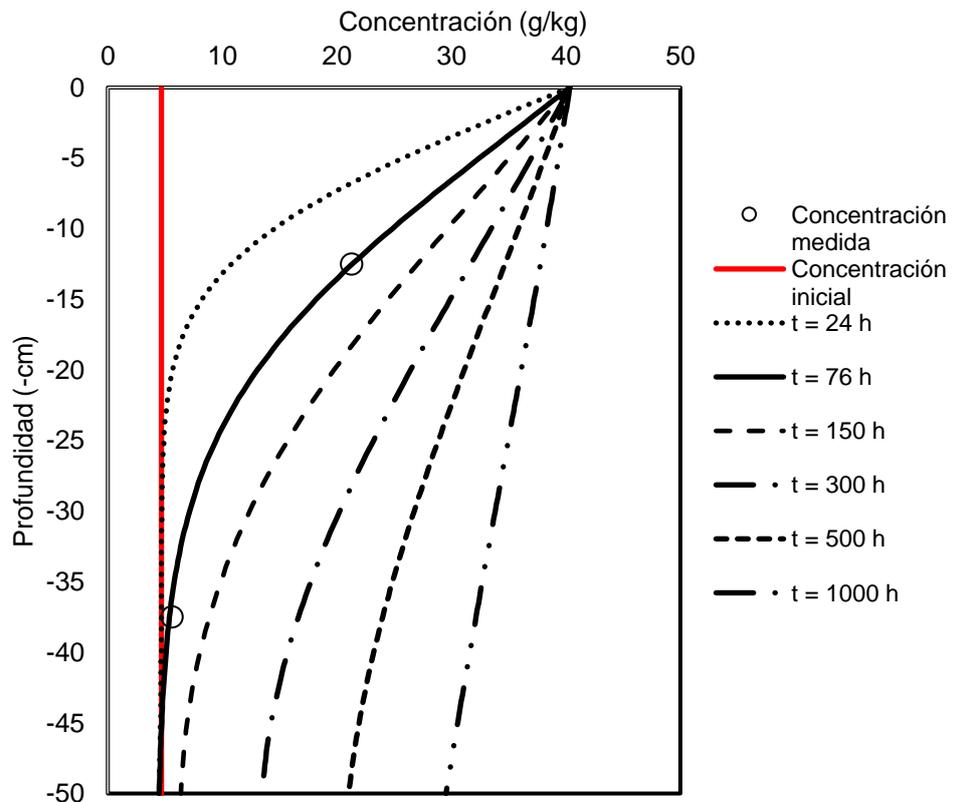


Figura 32. Resultados del escenario 1 para C1.

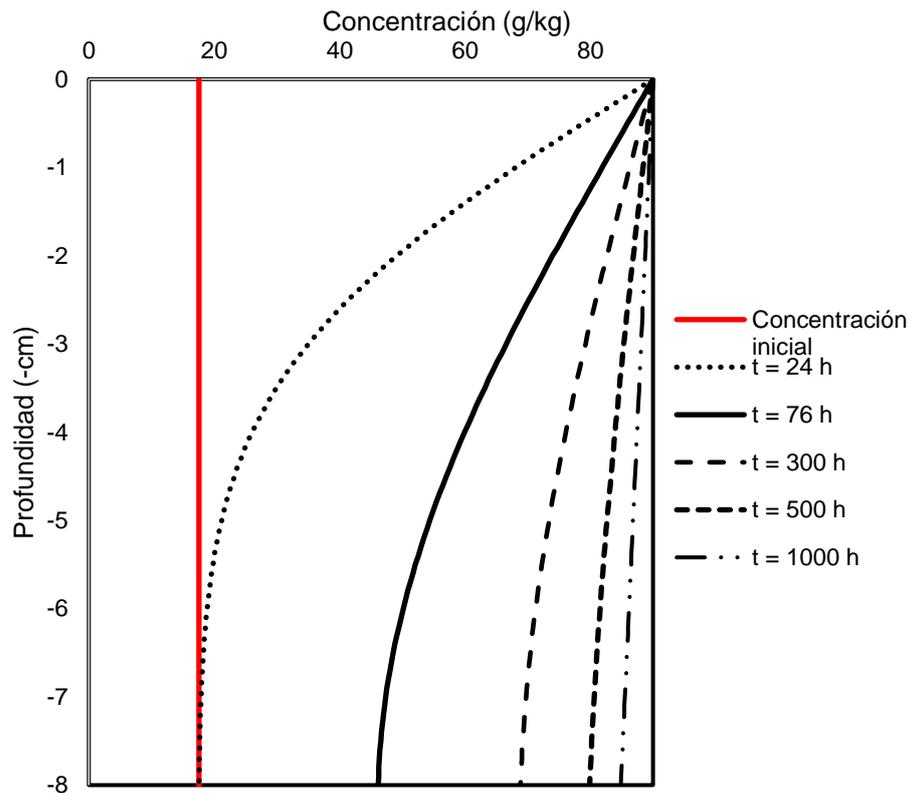


Figura 33. Resultados del escenario 1 para C2.

4.2. Escenario 2: Aplicación de glifosato hasta cierto tiempo

El escenario de la aplicación del glifosato hasta un tiempo específico y luego la aplicación de sólo agua en los dos suelos (lavado) disminuiría considerablemente las concentraciones de este contaminante en los dos casos. Esto resulta ser muy útil, ya que, a diferencia del escenario anterior, en donde se aplicó una la concentración en un tiempo prolongado (1000 h), en este, una concentración relativamente alta en un corto tiempo puede significar una menor carga de contaminante y por lo tanto una mayor reacción del suelo en pro de la degradación de este contaminante. En la **Figura 34**, donde se muestran los resultados de este escenario para C1 y la **Figura 35** para C2, es posible observar que los valores de glifosato en el suelo, especialmente los encontrados en los horizontes más profundos, muestran una disminución en los valores reportados en el suelo y por lo tanto un resultado más cercano a los valores encontrados en el punto antes de la prueba. En las gráficas, el tiempo cero ($t = 0$) hace referencia al tiempo final de la prueba para cada uno de los casos, en los cuales se aplicó una cierta concentración de glifosato y a partir de allí se comienza a aplicar agua.

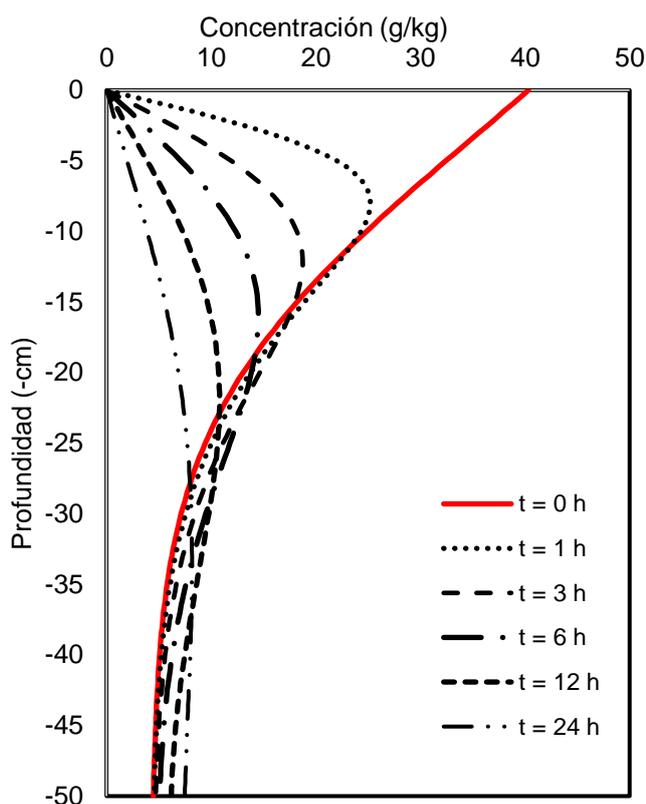


Figura 34. Resultados del escenario 2 para C1.

Teniendo en cuenta los tiempos en los que se supera el valor de la concentración en el tiempo de referencia ($t = 0$), es posible analizar una notable diferencia entre los casos 1 y 2; mientras en el caso 1 ocurre un proceso más lento en el cual se da un lavado que acerca las concentraciones en las zonas más profundas del suelo al valor de referencia ($t = 0$), en el caso 2, las concentraciones en esta misma zona resultan ser mayores y en tiempos más cortos, lo que permite inferir que la vulnerabilidad en C2 resulta ser mayor a la de C1. Esto indica que este escenario tendría una repercusión significativa a la hora de aplicar glifosato en el suelo, ya que disminuiría considerablemente las cargas y por lo tanto el riesgo de contaminación sería significativamente menor, tanto en lo relacionado con el suelo como con las aguas subterráneas. Sin embargo, resulta ser conflictivo, ya que sí se da un fenómeno de contaminación y puede darse el caso en el que sea usado para generar reportes no certeros sobre los procesos de contaminación en el suelo.

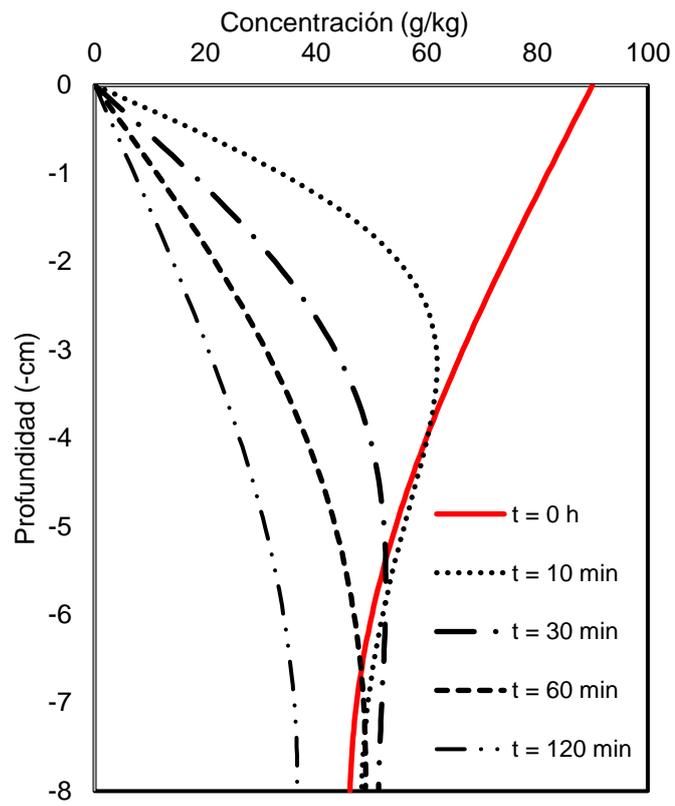


Figura 35. Resultados del escenario 2 para C2.

VIII. CONCLUSIONES

Las características fisicoquímicas de los suelos evaluados permitieron obtener una noción bastante clara de los factores que influyen sobre el transporte del glifosato en el suelo, especialmente cuando se trata de la granulometría. Aunque en ambos casos, las texturas resultaron ser en su mayoría, limosas, (Arcillo limoso para C1 y Franco Limoso para C2), las diferencias entre los contenidos de arena, limo y arcilla marcaron un papel fundamental en el transporte del agua, y por lo tanto de la solución de glifosato, en los suelos, lo cual pudo corroborarse con los valores de concentración obtenidas en el perfil del suelo al final de cada prueba. Adicionalmente, los valores de materia orgánica y carbono orgánico de ambos casos resultaron ser relativamente altos, especialmente en C2, lo que también pudo haber influido en la degradación del contaminante en el suelo, sin embargo, el rol de la textura resultó ser más significativo.

Las concentraciones iniciales de glifosato en el suelo resultaron ser relativamente altas, especialmente si se les compara con el límite máximo establecido para suelos por la CCME, incluso en C1 que se trata de una parcela experimental y no de agricultura intensiva como es el caso de C2; esto indica procesos de contaminación en los suelos y por lo tanto un riesgo de calidad en las aguas subterráneas, especialmente en C2 que se localizan sobre el acuífero Valle de San Juan del Río, en estado de Querétaro, cuya agua se utiliza para consumo humano.

La caracterización de estos parámetros en el suelo logró obtener la curva granulométrica, la cual, a través de métodos inversos, partiendo de la lámina infiltrada experimental se obtuvo la curva de retención de humedad y curva de conductividad hidráulica, esto a través de la optimización de los parámetros de la ecuación de Richards (conductividad hidráulica saturada y presión característica de los suelos). El ajuste de estos parámetros se categorizó como “muy bueno”, por lo que fue posible describir el perfil de humedad en cada uno de los puntos analizados y por lo tanto obtener el vector de velocidad de Darcy, que fue necesario para la modelación del transporte de glifosato en cada suelo.

Con los valores de concentración inicial y con los valores de concentración de glifosato en el perfil de los suelos en ambos casos, se obtuvo el ajuste de los parámetros que permitieron optimizar la ecuación de Advección-Dispersión a través del cálculo del coeficiente de dispersividad y por lo tanto modelar el comportamiento del contaminante en los suelos, lo que también se ajustó relativamente bien. Esto permite concluir que el modelo de transporte de glifosato se ajusta adecuadamente a lo ocurrido en la fase de experimentación en los dos suelos y por lo tanto da pie a evaluar escenarios de simulación.

Los escenarios de simulación implementados permitieron evaluar la vulnerabilidad de cada suelo ante la acción del glifosato. Así, para el escenario de continuidad en la aplicación del glifosato se pudo observar que en C2 se alcanzarían concentraciones significativamente altas y por lo tanto esto representaría un grave riesgo de contaminación a las aguas subterráneas, en C1 el escenario sería similar, pero con valores menores que tardarían un mayor tiempo en alcanzarse. Por otro lado, el escenario de lavado o aplicación de glifosato hasta cierto tiempo representaría resultados positivos en ambos puntos, si de contrarrestar la contaminación se trata, esto especialmente porque se comprobó que dicho lavado, posterior a la aplicación de glifosato lograría que se presenten concentraciones menores en el suelo, luego de un cierto tiempo, sin embargo, dicho fenómeno representaría un grave riesgo dada la llegada del herbicida a los acuíferos.

En síntesis, el modelo de transporte de glifosato en el suelo se ajustó adecuadamente al experimental y pudo reproducir el comportamiento de dicho contaminante en dos tipos de suelo, un inceptisol de la zona tropical del Caribe colombiano y un vertisol de la zona templada semiárida de El Bajío mexicano; en esta última zona (C2) el comportamiento de este herbicida resultó ser más agresivo debido a la alta vulnerabilidad del suelo, si se le compara con el comportamiento de este contaminante en C1.

IX. BIBLIOGRAFÍA

- Abubakar, Y., Tijjani, H., Egbuna, C., Adetunji, C. O., Kala, S., Kryeziu, T. L., & Patrick-Iwuanyanwu, K. C. (2019). Pesticides, history, and classification. *Natural Remedies for Pest, Disease and Weed Control*, 29–42. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819304-4.00003-8>
- Akpan Usoh, G., Edwin Ahaneku, I., Taiwo Horsfall, I., Uwadiogwu Alaneme, G., & Hogan Itam, D. (2022). Numerical modeling and simulation of leachate transport in MSW contaminated soil: Impact on seasonal changes. *Cleaner Materials*, 4(April). <https://doi.org/10.1016/j.clema.2022.100089>
- Alagna, V., Bagarello, V., Di Prima, S., Giordano, G., & Iovino, M. (2013). A simple field method to measure the hydrodynamic properties of soil surface crust. *Journal of Agricultural Engineering*, 44(2s), 74–79. <https://doi.org/10.4081/jae.2013.s2.e14>
- Alaoui, A., & Helbling, A. (2006). Evaluation of soil compaction using hydrodynamic water content variation: Comparison between compacted and non-compacted soil. *Geoderma*, 134(1–2), 97–108. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2005.08.016>
- Alcántara-de la Cruz, R., Cruz-Hipolito, H. E., Domínguez-Valenzuela, J. A., & De Prado, R. (2021). Glyphosate ban in Mexico: potential impacts on agriculture and weed management. *Pest Management Science*, 77(9), 3820–3831. <https://doi.org/10.1002/ps.6362>
- Alcántara de la Cruz, R., Barro, F., Domínguez-Valenzuela, J. A., & De Prado, R. (2016). Physiological, morphological and biochemical studies of glyphosate tolerance in Mexican Cologania (*Cologania broussonetii* (Balb.) DC.). *Plant Physiology and Biochemistry*, 98, 72–80. <https://doi.org/10.1016/j.plaphy.2015.11.009>
- Alvarez-Manilla Aceves, A., Martínez-Peña, G. E. I., Pérez-Salazar, A., & Vázquez-Paulino, J. C. (2002). Caracterización de suelos y control espacial por medio de los sistemas de información geográfica; caso valle de Querétaro. *Publicación Técnica*, 203.
- Anand, J., Gosain, A. K., & Khosa, R. (2024). Hydrological and hydrodynamic modelling for flood management : A case study of the Yamuna River Basin in Delhi. *Journal of Hydrology: Regional Studies*, 56(September), 101960. <https://doi.org/10.1016/j.ejrh.2024.101960>
- Aryeni, T., & Ginting, V. (2022). A semi-analytical solution of Richards Equation for two-layered one-dimensional soil. *Advances in Water Resources*, 165(March), 104199. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2022.104199>
- ASTM D422. (2007). ASTM D-422 Standard Test Method for Particle Size Analysis. In *ASTM Internacional* (Vol. 63).
- Bejarano-González, F. (2017). Los plaguicidas altamente peligrosos en México. In *Red de Acción sobre Plaguicidas y Alternativas en México*, A. C.

- Bernasconi, C., Demetrio, P. M., Alonso, L. L., Mac Loughlin, T. M., Cerdá, E., Sarandón, S. J., & Marino, D. J. (2021). Evidence for soil pesticide contamination of an agroecological farm from a neighboring chemical-based production system. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 313(July 2020). <https://doi.org/10.1016/j.agee.2021.107341>
- Bhaskara, B. L., & Nagaraja, P. (2006). Direct sensitive spectrophotometric determination of glyphosate by using ninhydrin as a chromogenic reagent in formulations and environmental water samples. *Helvetica Chimica Acta*, 89(11), 2686–2693. <https://doi.org/10.1002/hlca.200690240>
- Bolan, S., Padhye, L. P., Mulligan, C. N., Alonso, E. R., Saint-Fort, R., Jasemizad, T., Wang, C., Zhang, T., Rinklebe, J., Wang, H., Siddique, K. H. M., Kirkham, M. B., & Bolan, N. (2023). Surfactant-enhanced mobilization of persistent organic pollutants: Potential for soil and sediment remediation and unintended consequences. *Journal of Hazardous Materials*, 443(October 2022). <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2022.130189>
- Cabrera, A., Bustos, M., Rosas, M., Romero, M., & Díaz, L. (2019). *Manual para el curso de Edafología Laboratorio y Campo*.
- Causon, D. M., & Mingham, C. G. (2010). *Introductory Finite Difference Methods for PDEs*.
- Chai, T., & Draxler, R. R. (2014). Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)? -Arguments against avoiding RMSE in the literature. *Geoscientific Model Development*, 7(3), 1247–1250. <https://doi.org/10.5194/gmd-7-1247-2014>
- Chapra, S., & Canale, R. (2006). Numerical Methods for Engineers. In *Numerical Methods for Engineers, Second Edition* (McGrawHill).
- Chávez, C. A. (2010). *Solución Numérica de las Ecuaciones de Transferencia de Agua y Solute en Riego y Drenaje* [Universidad Autónoma de Querétaro]. <http://ri-ng.uaq.mx/handle/123456789/571>
- Cimbala, J. M., & Cengel, Y. a. (2001). Mecánica de Fluidos: Fundamentos y Aplicaciones. *McGrawHill, Primera Ed*, 10–11. <https://doi.org/10.1017/CBO9781107415324.004>
- Combatt Caballero, E. M., Martínez, G., & Polo Santos, J. M. (2005). Caracterización química y física de los suelos agroforestales de la zona alta de Córdoba. *Temas Agrarios*, 10(2), 5–14. <https://doi.org/10.21897/rta.v10i2.630>
- Conagua. (2020). *ACTUALIZACIÓN DE LA DISPONIBILIDAD MEDIA ANUAL DE AGUA EN EL ACUÍFERO MOCTEZUMA (2210) ESTADO DE QUERÉTARO* (Issue 1113).
- Concyteq. (2002). *Uso actual y potencial del suelo en los municipios conurbados de Querétaro*.
- da Silva, C. C., Souza, M. de F., Passos, A. B. R. de J., Silva, T. S., Borges, M.

- P. da S., dos Santos, M. S., & Silva, D. V. (2022). Risk of environmental contamination due to the hexazinone application in agricultural soils in northeastern Brazil. *Geoderma Regional*, 28(January). <https://doi.org/10.1016/j.geodrs.2022.e00481>
- De La Cruz, A. (2005). *Generación Numérica de Mallas Armónicas-Adaptivas y su Aplicación a la Solución de Algunas EDP's*.
- de León-Mojarro, B., Prado-Hernández, J. V., Verdier, J., & Fuentes-Ruiz, C. (2007). Simulación numérica del movimiento de estructuras de control en canales de riego. *Agrociencia*, 41(1), 75–86.
- De Souza, E. S., Antonino, A. C. D., Angulo-Jaramillo, R., & Netto, A. M. (2008). Hydrodynamic characterization of soils: Application of the Beerkan method. *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental*, 12(2), 128–135. <https://doi.org/10.1590/S1415-43662008000200004>
- Descroix, L., Gonzalez Barrios, J. L., Vandervaere, J. P., Viramontes, D., & Bollery, A. (2002). An experimental analysis of hydrodynamic behaviour on soils and hillslopes in a subtropical mountainous environment (Western Sierra Madre, Mexico). *Journal of Hydrology*, 266(1–2), 1–14. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(02\)00099-9](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(02)00099-9)
- Diamantopoulos, E., Šimůnek, J., Oberdörster, C., Hammel, K., Jene, B., Schröder, T., & Harter, T. (2017). Assessing the Potential Exposure of Groundwater to Pesticides: A Model Comparison. *Vadose Zone Journal*, 16(11), vzj2017.04.0070. <https://doi.org/10.2136/vzj2017.04.0070>
- Dougherty, J., Kohavi, R., & Sahami, M. (1995). Supervised and Unsupervised Discretization of Continuous Features. In *Machine Learning Proceedings 1995*. Morgan Kaufmann Publishers, Inc. <https://doi.org/10.1016/b978-1-55860-377-6.50032-3>
- Druart, C., Delhomme, O., De Vaufleury, A., Ntcho, E., & Millet, M. (2011). Optimization of extraction procedure and chromatographic separation of glyphosate, glufosinate and aminomethylphosphonic acid in soil. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 399(4), 1725–1732. <https://doi.org/10.1007/s00216-010-4468-z>
- Dusek, J., Dohnal, M., Snehota, M., Sobotkova, M., Ray, C., & Vogel, T. (2015). Transport of bromide and pesticides through an undisturbed soil column: A modeling study with global optimization analysis. *Journal of Contaminant Hydrology*, 175–176, 1–16. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2015.02.002>
- Eduah, J. O., Arthur, A., Dogbatse, J. A., Amoako-Attah, I., & Afful, E. A. (2024). Ecological effects of soil physicochemical properties and copper speciation on the microbial properties associated with land use management in cacao production. *Environmental Technology and Innovation*, 33(December 2023), 103538. <https://doi.org/10.1016/j.eti.2024.103538>
- Eid, M. H., Shebl, A., Eissa, M., Mohamed, E. A., Fahil, A. S., Ramadan, H. S., Abukhadra, M. R., El-Sherbeeney, A. M., Kovacs, A., & Szűcs, P. (2024).

- Comprehensive approach integrating remote sensing, machine learning, and physicochemical parameters to detect hydrodynamic conditions and groundwater quality deterioration in non-rechargeable aquifer systems. *Heliyon*, 10(12). <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e32992>
- FAO. (2014). Guía para la descripción de suelos. In *Organización de las Naciones Unidas para la Agricultura y la Alimentación* (Vol. 3, Issue 4). file:///C:/Users/Alina Belen Ortiz/Downloads/a0541s00(1).pdf%0Ahttps://www.fao.org/3/a0541s/a0541s.pdf
- Ferreira, N. G. C., da Silva, K. A., Guimarães, A. T. B., & de Oliveira, C. M. R. (2023). Hotspots of soil pollution: Possible glyphosate and aminomethylphosphonic acid risks on terrestrial ecosystems and human health. *Environment International*, 179(August). <https://doi.org/10.1016/j.envint.2023.108135>
- Fuentes-Ruiz, C. (1992). *Approche fractale des transferts hydriques dans les sols non-saturés* [Université Joseph Fourier]. <https://theses.fr/1992GRE10147>
- Fuentes, C., Antonino, A. C. D., Sepúlveda, J., Zataráin, F., & de León, B. (2003). Predicción de la conductividad hidráulica relativa de los suelos con modelos fractales. *Ingeniería Hidráulica En Mexico*, 18(4), 31–40.
- Fuentes, C., Chávez, C., & Brambila, F. (2020). Relating hydraulic conductivity curve to soil-water retention curve using a fractal model. *Mathematics*, 8(12), 1–14. <https://doi.org/10.3390/math8122201>
- Fuentes, C., de León, B., Saucedo, H., Parlange, J. Y., & Antonino, A. C. D. (2004). El sistema de ecuaciones de Saint-Venant y Richards del riego por gravedad: 1. La ley potencial de resistencia hidráulica. *Ingeniería Hidráulica En Mexico*, 19(2), 65–75.
- Fuentes, C., & Rendón, L. (2012). *Riego por Gravedad* (Primera Ed). Universidad Autónoma de Querétaro.
- Gallage, C., Kodikara, J., & Uchimura, T. (2013). Laboratory measurement of hydraulic conductivity functions of two unsaturated sandy soils during drying and wetting processes. *Soils and Foundations*, 53(3), 417–430. <https://doi.org/10.1016/j.sandf.2013.04.004>
- Gavin, H. P. (2019). The Levenberg-Marquardt Algorithm For Nonlinear Least Squares Curve-Fitting Problems. *Duke University*, 1–19. <http://people.duke.edu/~hpgavin/ce281/lm.pdf>
- Gobernación de Córdoba. (2010). *Capítulo 1 Generalidades del Departamento de Córdoba*. <https://repositoriocdim.esap.edu.co/bitstream/handle/123456789/24787/Capitulo1GeneralidadesDelDepartamentoDeCordoba-1.pdf?sequence=1>
- Gomasasca, S., Stefani, F., Fasola, E., La Porta, C. A., & Bocchi, S. (2024). Regional evaluation of glyphosate pollution in the minor irrigation network. *Chemosphere*, 355(March), 141679. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.141679>

- Guevara, D. P. (2004). Solución numérica de la ecuación de difusión-advección-reacción con un esquema de separación de operadores. *Miscelánea Matemática*, 39, 1–16. http://miscelaneamatematica.org/Misc39/Parra_d.pdf
- Gyabaah, D., Awuah, E., Kuffour, R. A., Antwi-Agyei, P., Wiafe, S., & Asiedu, S. B. (2024). Assessment of dumpsites leachate, geotechnical properties of the soil, and their impacts on surface and groundwater quality of Sunyani, Ghana. *Environmental Advances*, 16(February), 100548. <https://doi.org/10.1016/j.envadv.2024.100548>
- Hintze, S., Cochand, F., Glauser, G., & Hunkeler, D. (2024). Soil and Unsaturated Zone as a Long-Term Source for Pesticide Metabolites in Groundwater. *Water Research*, 261(June), 121901. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2024.121901>
- Hmimou, A., Maslouhi, A., Tamoh, K., & Candela, L. (2014). Experimental monitoring and numerical study of pesticide (carbofuran) transfer in an agricultural soil at a field site. *Comptes Rendus - Geoscience*, 346(9–10), 255–261. <https://doi.org/10.1016/j.crte.2014.03.003>
- Hu, H., Cui, Y., Li, C., Su, W., & Wang, Z. (2021). Improvement of three common methods for determining hydraulic conductivity curve of unsaturated soil upon wetting. *Journal of Hydrology*, 594(23), 125947. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.125947>
- IDEAM. (2015). Caracterización de los suelos y las tierras de Colombia. In *Suelos y Tierras de Colombia*. <http://documentacion.ideam.gov.co/openbiblio/bvirtual/005192/macizo/pdf/Capitulo4.pdf>
- IGAC. (2009). *Estudio general de suelos y zonificación de tierras del Departamento de Córdoba*.
- IGAC. (2021). *Descripción y muestreo de suelos*. http://igacnet2.igac.gov.co/intranet/UserFiles/File/DOCUMENTOS_SGI_2021/GAG/PC-GAG-05/IN-GAG-PC05-05_Descripcion_y_muestreo_de_suelos.pdf
- INEGI. (2021). Aspectos Geográficos: Querétatro. In *INEGI* (Vol. 60, Issue 5). https://www.inegi.org.mx/contenidos/app/areasgeograficas/resumen/resumen_22.pdf
- IUSS Working Group WRB. (2015). Base referencial mundial del recurso suelo 2014. In *Actualización 2015*. <https://www.iec.cat/mapasols/DocuInteres/PDF/Libre59.pdf>
- Janeau, J. L., Mauchamp, A., & Tarin, G. (1999). The soil surface characteristics of vegetation stripes in Northern Mexico and their influences on the system hydrodynamics. An experimental approach. *Catena*, 37(1–2), 165–173. [https://doi.org/10.1016/S0341-8162\(98\)00059-9](https://doi.org/10.1016/S0341-8162(98)00059-9)
- Jiang, N., & Qiu, C. (2022). Numerical analysis of a second order ensemble algorithm for numerical approximation of stochastic Stokes–Darcy

equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 406, 113934. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2021.113934>

- Jougnot, D., Linde, N., Revil, A., & Doussan, C. (2012). Derivation of Soil-Specific Streaming Potential Electrical Parameters from Hydrodynamic Characteristics of Partially Saturated Soils. *Vadose Zone Journal*, 11(1). <https://doi.org/10.2136/vzj2011.0086>
- Juárez, B. (2016). Consecuencias de un forzamiento mareal tipo mixto semidiurno en una laguna costera somera. In *Tesis de Maestría. Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California*. Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California.
- Kafaei, R., Arfaeinia, H., Savari, A., Mahmoodi, M., Rezaei, M., Rayani, M., Sorial, G. A., Fattahi, N., & Ramavandi, B. (2020). Organochlorine pesticides contamination in agricultural soils of southern Iran. *Chemosphere*, 240, 124983. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.124983>
- Kern, M., Taakili, A., & Zarrouk, M. M. (2020). Preconditioned iterative method for reactive transport with sorption in porous media. *Mathematical Modelling and Analysis*, 25(4), 546–568. <https://doi.org/10.3846/mma.2020.10626>
- Kim, H., Kim, D., Lee, Y., & Kim, H. (2020). Effect of soil box boundary conditions on dynamic behavior of model soil in 1 g shaking table test. *Applied Sciences (Switzerland)*, 10(13). <https://doi.org/10.3390/app10134642>
- Kuriakose, S. L., Devkota, S., Rossiter, D. G., & Jetten, V. G. (2009). Prediction of soil depth using environmental variables in an anthropogenic landscape, a case study in the Western Ghats of Kerala, India. *Catena*, 79(1), 27–38. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2009.05.005>
- Latorre, B., & Moret-Fernández, D. (2019). Simultaneous estimation of the soil hydraulic conductivity and the van Genuchten water retention parameters from an upward infiltration experiment. *Journal of Hydrology*, 572(March), 461–469. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2019.03.011>
- Lei, W., Tang, X., & Zhou, X. (2018). Transport of 3,5,6-trichloro-2-pyridinol (a main pesticide degradation product) in purple soil: Experimental and modeling. *Applied Geochemistry*, 88, 179–187. <https://doi.org/10.1016/j.apgeochem.2017.07.010>
- Li, J., Awasthi, M. K., Zhu, Q., Chen, X., Wu, F., Wu, F., & Tong, X. (2021). Modified soil physicochemical properties promoted sequestration of organic and inorganic carbon synergistically during revegetation in desertified land. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(6), 106331. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.106331>
- Liao, Y., Dong, L., Li, A., Lv, W., Wu, J., Zhang, H., Bai, R., Liu, Y., Li, J., Shangguan, Z., & Deng, L. (2023). Soil physicochemical properties and crusts regulate the soil infiltration capacity after land-use conversions from farmlands in semiarid areas. *Journal of Hydrology*, 626(26).

<https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2023.130283>

- Lin, H. I., & Lee, C. H. (2009). An approach to assessing the hydraulic conductivity disturbance in fractured rocks around the Syueshan tunnel, Taiwan. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 24(2), 222–230. <https://doi.org/10.1016/j.tust.2008.06.003>
- MADS. (2018). *Guía Nacional De Modelación Del Recurso Hídrico Para Aguas Superficiales Continentales*. http://www.andi.com.co/Uploads/Guía_modelación_Final_aguasuperficialcontinental.pdf
- Malamos, N., Barouchas, P. E., Liopa-Tsakalidi, A., Koulopoulos, A., Chatziioakeim, I., Vitiniotis, P., & Chalvatzis, C. (2015a). Soil Hydrodynamic Characteristics of Reclaimed Agricultural Land at Messolonghi's Polder. *Agriculture and Agricultural Science Procedia*, 4, 282–289. <https://doi.org/10.1016/j.aaspro.2015.03.032>
- Malamos, N., Barouchas, P. E., Liopa-Tsakalidi, A., Koulopoulos, A., Chatziioakeim, I., Vitiniotis, P., & Chalvatzis, C. (2015b). Soil Hydrodynamic Characteristics of Reclaimed Agricultural Land at Messolonghi's Polder. *Agriculture and Agricultural Science Procedia*, 4, 282–289. <https://doi.org/10.1016/j.aaspro.2015.03.032>
- Márquez, D., Faúndez, C., Aballay, E., Haberland, J., & Kremer, C. (2017). Assesing the vertical movement of a nematicide in a sandy loam soil and its correspondence using a numerical model (HYDRUS 1D). *Journal of Soil Science and Plant Nutrition*, 17(1), 167–179. <https://doi.org/10.4067/S0718-95162017005000013>
- Martínez-Escudero, C. M., Garrido, I., Ros, C., Flores, P., Hellín, P., Contreras, F., & Fenoll, J. (2023). Remediation of pesticides in commercial farm soils by solarization and ozonation techniques. *Journal of Environmental Management*, 329(December 2022), 117062. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2022.117062>
- Mateus, M., Vieira, R. da S., Almeida, C., Silva, M., & Reis, F. (2018). ScoRE-A simple approach to select a water quality model. *Water (Switzerland)*, 10(12). <https://doi.org/10.3390/w10121811>
- Mencaroni, M., Longo, M., Cardinali, A., Lazzaro, B., Zanin, G., Dal Ferro, N., & Morari, F. (2023). Glyphosate and AMPA dynamics during the transition towards conservation agriculture: Drivers under shallow groundwater conditions. *Soil and Tillage Research*, 229(May 2022), 105659. <https://doi.org/10.1016/j.still.2023.105659>
- Mohrath, D., Bruckler, L., Bertuzzi, P., Gaudu, J. C., & Bourlet, M. (1997). Error Analysis of an Evaporation Method for Determining Hydrodynamic Properties in Unsaturated Soil. *Soil Science Society of America Journal*, 61(3), 725–735. <https://doi.org/10.2136/sssaj1997.03615995006100030004x>

- Morrás, H., Behrends Kraemer, F., Sainz, D., Fernández, P., & Chagas, C. (2022). Soil structure and glyphosate fate under no-till management in the Pampa region. II. Glyphosate and AMPA persistence and spatial distribution in the long-term. A conceptual model. *Soil and Tillage Research*, 223(July). <https://doi.org/10.1016/j.still.2022.105471>
- Mousavi Nezhad, M., Javadi, A. A., & Rezaia, M. (2011). Modeling of contaminant transport in soils considering the effects of micro- and macro-heterogeneity. *Journal of Hydrology*, 404(3–4), 332–338. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2011.05.004>
- Murcia Fandiño, J. S., Nagalli, A., & Moro Filho, R. C. (2020). Modeling of the dispersion of pollutants in porous media: Case of a landfill in Brazil. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 8(6), 104400. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.104400>
- Nahar, K., & Niven, R. K. (2023). An Analysis of Miscible Displacement and Numerical Modelling of Glyphosate Transport in Three Different Agricultural Soils. *Agronomy*, 13(10), 1–12. <https://doi.org/10.3390/agronomy13102539>
- Najdi, A., Encalada, D., Mendes, J., Prat, P. C., & Ledesma, A. (2023). Evaluating innovative direct and indirect soil suction and volumetric measurement techniques for the determination of soil water retention curves following drying and wetting paths. *Engineering Geology*, 322(May), 107179. <https://doi.org/10.1016/j.enggeo.2023.107179>
- Ona, J. (2022). Leaching risk assessment of pesticides from soil as function of soil properties, pesticide properties and rainfall characteristics using HYDRUS 1D numerical model. *Poljoprivredna Tehnika*, 47(4), 67–81. <https://doi.org/10.5937/poljteh2204067o>
- Padilla, J. T., & Selim, H. M. (2018). Glyphosate transport in two louisiana agricultural soils: Miscible displacement studies and numerical modeling. *Soil Systems*, 2(3), 1–18. <https://doi.org/10.3390/soilsystems2030053>
- Palma-Bautista, C., Gherekhloo, J., Domínguez-Martínez, P. A., Domínguez-Valenzuela, J. A., Cruz-Hipolito, H. E., Alcántara-de la Cruz, R., Rojano-Delgado, A. M., & De Prado, R. (2019). Characterization of three glyphosate resistant *Parthenium hysterophorus* populations collected in citrus groves from Mexico. *Pesticide Biochemistry and Physiology*, 155, 1–7. <https://doi.org/10.1016/j.pestbp.2018.11.002>
- Pečan, U., Pintar, M., & Kastelec, D. (2023). Variability of in situ soil water retention curves under different tillage systems and growing seasons. *Soil and Tillage Research*, 233(May). <https://doi.org/10.1016/j.still.2023.105779>
- Qi, S., Li, X., Luo, J., Han, R., Chen, Q., Shen, D., & Shentu, J. (2022). Soil heterogeneity influence on the distribution of heavy metals in soil during acid rain infiltration: Experimental and numerical modeling. *Journal of Environmental Management*, 322(July). <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2022.116144>

- Rasool, S., Rasool, T., & Gani, K. M. (2022). A review of interactions of pesticides within various interfaces of intrinsic and organic residue amended soil environment. *Chemical Engineering Journal Advances*, 11(April), 100301. <https://doi.org/10.1016/j.ceja.2022.100301>
- Refsgaard, J. C., & Henriksen, H. J. (2004). Modelling guidelines - Terminology and guiding principles. *Advances in Water Resources*, 27(1), 71–82. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2003.08.006>
- Reynolds, W. D., Drury, C. F., & Handyside, P. (2023). Development of an extended Schnute model for more physically realistic representations of soil water retention and moisture capacity curves. *Canadian Journal of Soil Science*, 103(3), 493–509. <https://doi.org/10.1139/cjss-2023-0014>
- Ribeiro, F. L. B., Galeão, A. C., Romeiro, N. M. L., & Landau, L. (2001). Finite element techniques for water quality models. *Environmental Studies*, February, 255–264.
- Richards, L. A. (1931). Capillary Conduction of Liquids through Porous Mediums. *Journal of Applied Physics*, 1, 318–333. <https://doi.org/http://dx.doi.org/10.1063/1.1745010>
- Ritter, A., & Muñoz-Carpena, R. (2013). Performance evaluation of hydrological models: Statistical significance for reducing subjectivity in goodness-of-fit assessments. *Journal of Hydrology*, 480, 33–45. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2012.12.004>
- Rivero, S. de J. (2017). *Modelación de la transferencia de agua y transporte de cromo (Cr) en suelo*. Universidad Autónoma de Querétaro.
- Rodrigo-Illarri, J., Rodrigo-Clavero, M. E., Cassiraga, E., & Ballesteros-Almonacid, L. (2020). Assessment of groundwater contamination by terbuthylazine using vadose zone numerical models. Case study of valencia province (spain). *International Journal of Environmental Research and Public Health*, 17(9). <https://doi.org/10.3390/ijerph17093280>
- Rodriguez G, A. P., & Araujo Leon, J. A. (2018). The glyphosate herbicide in Yucatan, Mexico. *MOJ Bioequivalence & Bioavailability*, 5(6). <https://doi.org/10.15406/mojbb.2018.05.00115>
- Sámano-Celorio, M. L. (2011). Desarrollo e integración de modelos numéricos de calidad del agua en un sistema de información geográfica. In *TDR (Tesis Doctorales en Red)*. Universidad de Cantabria.
- Santos, A., Lorenzo, D., & Dominguez, C. M. (2021). *Persulfate in Remediation of Soil and Groundwater Contaminated by Organic Compounds*. https://doi.org/10.1007/978-3-030-68140-1_10
- Santos, R. A. dos, & Esquivel, E. R. (2018). Saturated anisotropic hydraulic conductivity of a compacted lateritic soil. *Journal of Rock Mechanics and Geotechnical Engineering*, 10(5), 986–991. <https://doi.org/10.1016/j.jrmge.2018.04.005>

- Schoeneberger, P. J., & Wysocki, D. A. (2005). Hydrology of soils and deep regolith: A nexus between soil geography, ecosystems and land management. *Geoderma*, 126(1-2 SPEC. ISS.), 117–128. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2004.11.010>
- Secretaria de Economía. (2016). NORMA MEXICANA NMX-AA-132-SCFI-2016. *Muestreo De Suelos Para La Identificación Y La Cuantificación De Metales Y Metaloides, Y Manejo De La Muestra*, 35. <http://www.economia-nmx.gob.mx/normas/nmx/2010/nmx-aa-132-scfi-2016.pdf>
- Shankar, A., & Garkoti, S. C. (2024). Influence of forest types on soil physicochemical and biological characteristics of associated agroecosystems in the central Himalaya. *Science of the Total Environment*, 906(September 2023), 167731. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.167731>
- Sheikhbaglou, A., Khodaverdiloo, H., Zeinalzadeh, K., Kheirfam, H., & Azad, N. (2021). Fitting process-dependence performance of the van Genuchten soil water retention model to simulate the soil water flow. *Soil and Tillage Research*, 209(February), 104952. <https://doi.org/10.1016/j.still.2021.104952>
- Singh, A., & Verdi, A. (2024). Estimating the soil water retention curve by the HYPROP-WP4C system, HYPROP-based PCNN-PTF and inverse modeling using HYDRUS-1D. *Journal of Hydrology*, 639(June), 131657. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2024.131657>
- Soares, C., Pereira, R., Spormann, S., & Fidalgo, F. (2019). Is soil contamination by a glyphosate commercial formulation truly harmless to non-target plants? – Evaluation of oxidative damage and antioxidant responses in tomato. *Environmental Pollution*, 247, 256–265. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2019.01.063>
- Somlyódy, L., & Varis, O. (1992). *Water Quality Modeling of Rivers and Lakes*. June, 93.
- Stuuroop, J. C., van der Zee, S. E. A. T. M., & French, H. K. (2022). The influence of soil texture and environmental conditions on frozen soil infiltration: A numerical investigation. *Cold Regions Science and Technology*, 194(December 2021), 103456. <https://doi.org/10.1016/j.coldregions.2021.103456>
- Su, C., Yang, Y., Jia, M., & Yan, Y. (2024). Integrated framework to assess soil potentially toxic element contamination through 3D pollution analysis in a typical mining city. *Chemosphere*, 359(March), 142378. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2024.142378>
- Sun, F., Xiao, B., & Kidron, G. J. (2022). Towards the influences of three types of biocrusts on soil water in drylands: Insights from horizontal infiltration and soil water retention. *Geoderma*, 428(26), 116136. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2022.116136>

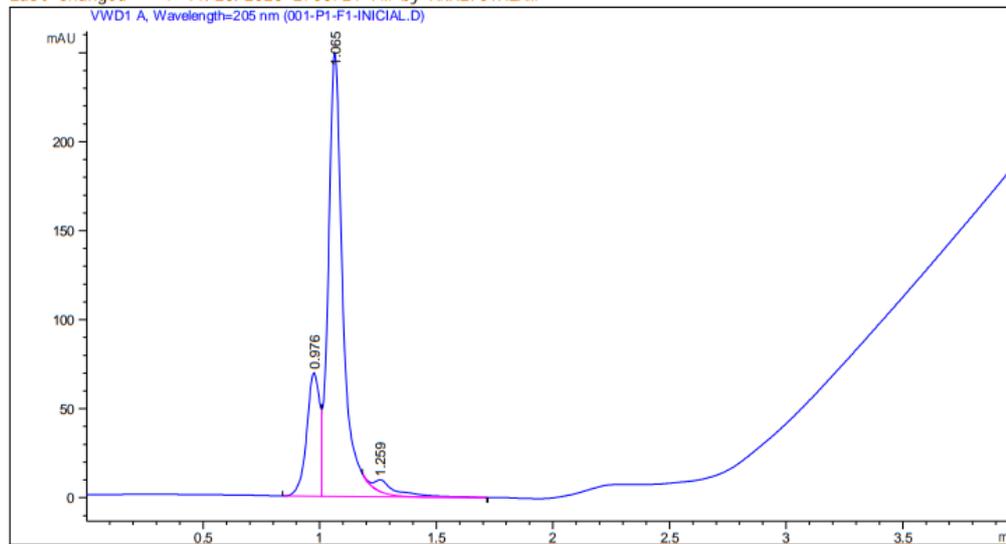
- Sun, F., Xiao, B., & Tuller, M. (2024). Multifaceted impacts of moss-dominated biocrusts on dryland soils: From soil pore structure to aeration and water infiltration. *Catena*, 236(2), 107755. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2023.107755>
- Sun, G., Du, Y., Yin, J. X., Jiang, Y. Z., Zhang, D., Jiang, B., Li, G., Wang, H., Kong, F., Su, L., & Hu, J. (2019). Response of microbial communities to different organochlorine pesticides (OCPs) contamination levels in contaminated soils. *Chemosphere*, 215, 461–469. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2018.09.160>
- Tao, Y., Zou, Z., Guo, L., He, Y., Lin, L., Lin, H., & Chen, J. (2020). Linking soil macropores, subsurface flow and its hydrodynamic characteristics to the development of Benggang erosion. *Journal of Hydrology*, 586(March), 124829. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2020.124829>
- Terleev, V., Nikonorov, A., Togo, I., Volkova, Y., Garmanov, V., Shishov, D., Pavlova, V., Semenova, N., & Mirschel, W. (2016). Modelling the Hysteretic Water Retention Capacity of Soil for Reclamation Research as a Part of Underground Development. *Procedia Engineering*, 165, 1776–1783. <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2016.11.922>
- Todisco, F., Vergni, L., Iovino, M., & Bagarello, V. (2023). Changes in soil hydrodynamic parameters during intermittent rainfall following tillage. *Catena*, 226(January), 107066. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2023.107066>
- Tong, S., Li, G., Li, X., Li, J., Zhai, H., Zhao, J., Zhu, H., Liu, Y., Chen, W., & Hu, X. (2023). Soil Water Erosion and Its Hydrodynamic Characteristics in Degraded Bald Patches of Alpine Meadows in the Yellow River Source Area, Western China. *Sustainability (Switzerland)*, 15(10). <https://doi.org/10.3390/su15108165>
- Toride, N., & Leij, F. J. (1995). Parameters from Laboratory or Field. *Transport*, 137, 1–131. http://afsrweb.usda.gov/SP2UserFiles/Place/53102000/pdf_pubs/P1444.pdf
- Torres-Marchena, C., & Torres-Bejarano, F. (2015). *Aplicación del Modelo Numérico MOHID para el Estudio Hidrodinámico y de Transporte de la Ciénaga Mallorcaín*.
- Verdi, A., & Naseri, M. (2024). Effects of tire wear particles on the water retention of soils with different textures in the full moisture range. *Journal of Contaminant Hydrology*, 264(April), 104345. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2024.104345>
- Viccione, G., Stoppiello, M. G., Lauria, S., & Cascini, L. (2020). *Numerical Modeling on Fate and Transport of Pollutants in the Vadose Zone*. 34. <https://doi.org/10.3390/environsciproc2020002034>
- Villarreal, R., Soracco, C. G., Salazar, M. P., Bellora, G. L., Valdés-Abellán, J., &

- Lozano, L. A. (2020). Glyphosate dynamics prediction in a soil under conventional and no-tillage systems during the crop cycle. *Revista Brasileira de Ciencia Do Solo*, 44, 1–18. <https://doi.org/10.36783/18069657rbc20190130>
- Villholth, K. G., Jarvis, N. J., Jacobsen, O. H., & de Jonge, H. (2000). Field Investigations and Modeling of Particle-Facilitated Pesticide Transport in Macroporous Soil. *Journal of Environmental Quality*, 29(4), 1298–1309. <https://doi.org/10.2134/jeq2000.00472425002900040037x>
- Wang, Q., Li, S., Jia, P., Qi, C., & Ding, F. (2013). A review of surface water quality models. *The Scientific World Journal*, 2013. <https://doi.org/10.1155/2013/231768>
- Wang, S., Fan, W., Zhu, Y., & Zhang, J. (2021). The effects of fitting parameters in best fit equations in determination of soil-water characteristic curve and estimation of hydraulic conductivity function. *Rhizosphere*, 17(December 2020), 100291. <https://doi.org/10.1016/j.rhisph.2020.100291>
- Willmott, C. J., & Matsuura, K. (2005). Advantages of the mean absolute error (MAE) over the root mean square error (RMSE) in assessing average model performance. *Climate Research*, 30(1), 79–82. <https://doi.org/10.3354/cr030079>
- Xue, S., Ke, W., Zeng, J., Baltazar Tabelin, C., Xie, Y., Tang, L., Xiang, C., & Jiang, J. (2023). Pollution prediction for heavy metals in soil-groundwater systems at smelting sites. *Chemical Engineering Journal*, 473(August), 145499. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.145499>
- Zataráin, F., Fuentes, C., Palacios, O., Mercado, J., Brambila, F., & García, N. (1998). Modelación del transporte de agua y solutos en el suelo. *Agrociencia*, 32(4), 373–383. <https://www.agrociencia-colpos.org/index.php/agrociencia/article/view/1569>
- Zhou, X., Shi, X., Zhang, L., & Zhou, Y. (2012). Effects of Pesticide-Contamination on Population and Activity of Bacteria in Purple Paddy Soil. *Energy Procedia*, 16, 284–289. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2012.01.047>
- Zhuang, C., Yan, L., Zhou, Z. fang, Wang, J. guo, & Dou, Z. (2021). Estimation of aquitard hydraulic conductivity and skeletal specific storage considering non-Darcy flow. *Water Science and Engineering*, 14(4), 269–276. <https://doi.org/10.1016/j.wse.2021.09.003>
- Zoppou, C., & Knight, J. (1997). Advection-Diffusion Equations With Spatially. *JOURNAL OF HYDRAULIC ENGINEERING*, 123(1), 144–148.


```

=====
Acq. Operator   : ANALI STALAM                Seq. Line :    1
Sample Operator : ANALI STALAM
Acq. Instrument : HPLC LAM                    Location  : P1-F-01
Injection Date  : 11/28/2023 2:59:12 PM      Inj       :    1
                                                    Inj Volume: 20.000 µl
Sequence File   : C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1\Data\MJESTRAS SUELO GLI FOSATO2023-
                  11-28\MJESTRAS SUELO GLI FOSATO.S
Method          : C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1\Data\MJESTRAS SUELO GLI FOSATO2023-
                  11-28\GLI FOSATO NUEVO.M (Sequence Method)
Last changed    : 11/28/2023 2:58:21 PM by ANALI STALAM

```



=====
Area Percent Report
=====

```

Sorted By      :      Signal
Multiplier     :      1.0000
Dilution       :      1.0000
Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs

```

Signal 1: VWD1 A, Wavelength=205 nm

Peak #	RetTime [min]	Type	Width [min]	Area [mAU*s]	Height [mAU]	Area %
1	0.976	BV	0.0593	269.08884	69.31860	18.9906
2	1.065	VV R	0.0654	1096.96057	249.11929	77.4165
3	1.259	VB E	0.1030	50.91019	6.60034	3.5929

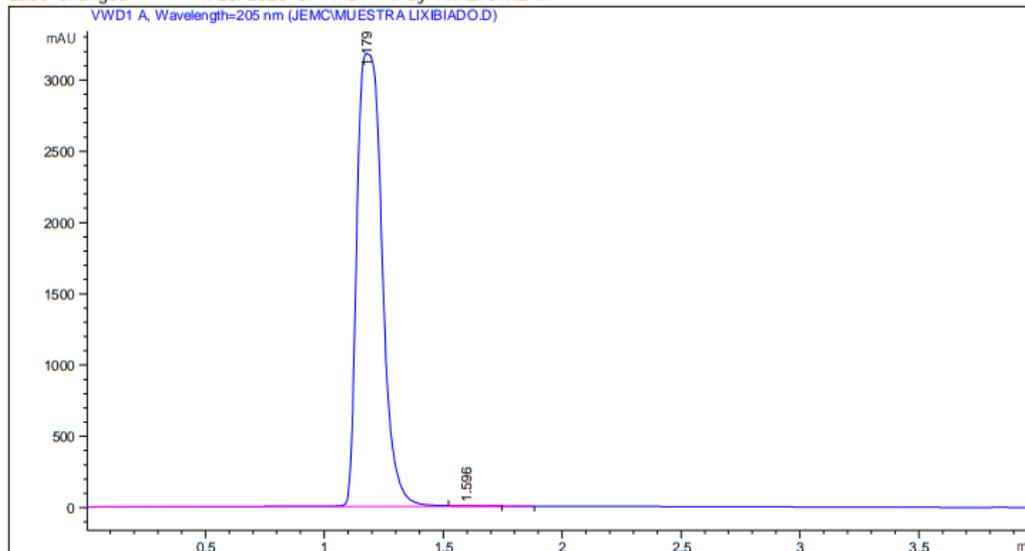
Totals : 1416.95959 325.03822

Figura 38. Reporte del cromatógrafo para la concentración de glifosato en el horizonte B del caso 1.

```

=====
Acq. Operator   : ANALI STALAM
Sample Operator : ANALI STALAM
Acq. Instrument : HPLC LAM
Injection Date  : 11/29/2023 11:37:41 AM
Location       : P1-F-01
Inj           : 1
Inj Volume    : 20.000 µl
Method        : C:\Users\Public\Documents\ChemStation\1\Methods\GLIFOSATO NUEVO.M
Last changed  : 11/28/2023 3:14:34 PM by ANALI STALAM

```



Area Percent Report

```

Sorted By      : Signal
Multiplier    : 1.0000
Dilution      : 1.0000
Sample Amount : 1.00000 [ng/ul] (not used in calc.)
Use Multiplier & Dilution Factor with ISTDs

```

Signal 1: VWD1 A, Wavelength=205 nm

Peak #	RetTime [min]	Type	Width [min]	Area [mAU*s]	Height [mAU]	Area %
1	1.179	BV R	0.1176	2.33074e4	3177.41406	99.9507
2	1.596	VB E	0.0663	11.49370	2.61155	0.0493

Totals : 2.33189e4 3180.02561

Figura 39. Reporte del cromatógrafo para la concentración de glifosato en el lixiviado resultante del caso 1.

En lo referente al caso 2, las concentraciones de glifosato se determinaron mediante métodos espectrofotométricos en el laboratorio de CIQUEC de la Universidad Autónoma de Querétaro, tomando como referencia las investigaciones de Bhaskara & Nagaraja (2006). La técnica se basa en la utilización de ninhidrina como reactivo cromogénico, que reacciona con el glifosato para formar un complejo coloreado cuya intensidad es directamente proporcional a la concentración del analito. Este enfoque destaca por su

simplicidad y efectividad en la detección de glifosato en matrices complejas, siendo una alternativa económica y accesible a otros métodos más sofisticados.

La metodología se fundamenta en una reacción química entre glifosato y ninhidrina, realizada en condiciones cuidadosamente controladas de pH y temperatura. Estas condiciones garantizan la formación óptima del complejo coloreado. La mezcla se calienta durante un tiempo específico para completar la reacción, generando un color característico cuya absorbancia se mide espectrofotométricamente. La longitud de onda utilizada corresponde al pico de máxima absorbancia del complejo, lo que asegura alta sensibilidad en la detección. La propuesta realizada por Bhaskara & Nagaraja (2006) y de la cual se basó la determinación de glifosato de la presente investigación sugiere la vía de reacción del glifosato con ninhidrina en presencia de molibdato de sodio mostrada en la siguiente figura:

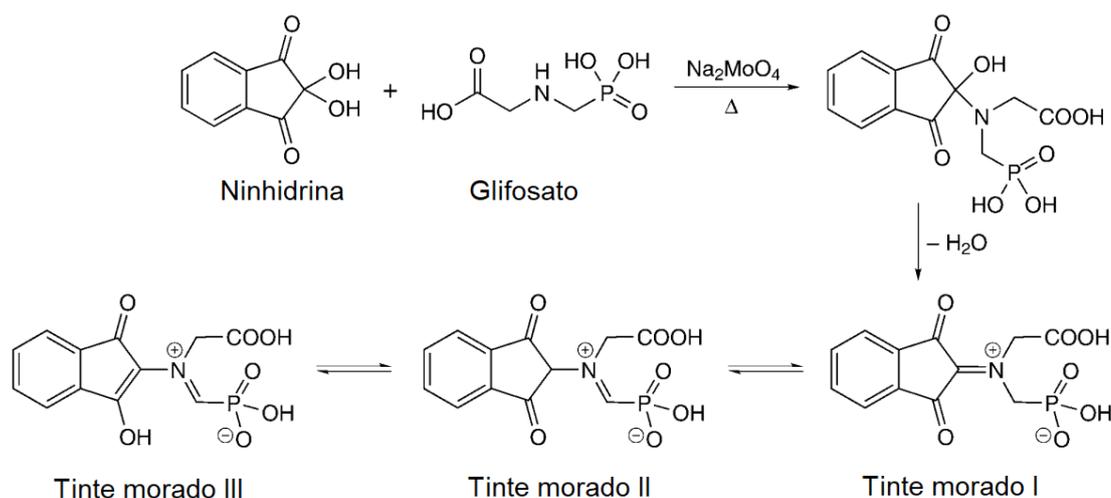


Figura 40. Propuesta de vía de reacción del glifosato con ninhidrina en presencia de molibdato de sodio.

Adaptado de Bhaskara & Nagaraja (2006)

Este procedimiento se destaca por ser directo, sensible y reproducible, permitiendo la detección del glifosato en niveles traza en matrices complejas, como el suelo. Además, su implementación es económica y práctica, lo que lo convierte en una herramienta valiosa para el monitoreo ambiental y la evaluación de formulaciones comerciales de herbicidas. Los resultados de la absorbancia en los ensayos definitivos de laboratorio para C2 se muestran a continuación:

Tabla 15. Absorbancia y valores de concentración para las concentraciones de glifosato en las pruebas realizadas en C2.

Caso 2							
Vol. extracción [L]	0.04						
Muestra	Absorbancia (y)	(x)	Factor de Dilución	Concentración [mg/L]	Concentración corregida [mg/L]	Peso muestra [g]	Concentración [g/kg]
C inicial	0.073	13.82	100	1381.54	2196.65	5.0011	17.57
Hte. 3.1	0.162	27.51	250	6876.92	10934.31	5.0802	86.09
Hte. 3.2	0.1	17.97	250	4492.31	7142.77	5.1246	55.75
Hte. 3.3	0.092	16.74	250	4184.62	6653.54	5.1266	51.91
Hte. 3.4	0.085	15.66	250	3915.38	6225.46	5.0227	49.58
Solución Inicial	0.234	38.58	2000	77169.23			
Lixiviado [h]	1034.33	0.106	18.89	666.67	12594.93		
	1937.858	0.096	17.35	666.67	11569.29		
	3169.181	0.084	15.51	666.67	10338.51		
	4539.629	0.092	16.74	666.67	11159.03		
	6233.381	0.07	13.35	666.67	8902.61		
	8726.637	0.085	15.66	666.67	10441.08		

2. Registro fotográfico



Toma de muestras



Identificación de horizontes



Horizontes identificados en C1



Horizontes identificados en suelo agrícola



Secado de muestras para C1



Molienda de suelo para C1



Tamizaje de muestras para C1



Montaje de la prueba para C1



Glifosato comercial usado para l prueba en C1



Solución de 40.3 g/L de glifosato



Lámina para la prueba realizada en C1



Aplicación de la solución de glifosato en la prueba C1



Glifosato antes (der.) y después (izq.) de la filtración en C1.



Preparación de las muestras C2.



Secado de las muestras C2



Tamizaje de las muestras C2.



Muestras de C2 sobre los tamices.



Prueba de densidad para los suelos.



Pruebas de pH para las muestras.



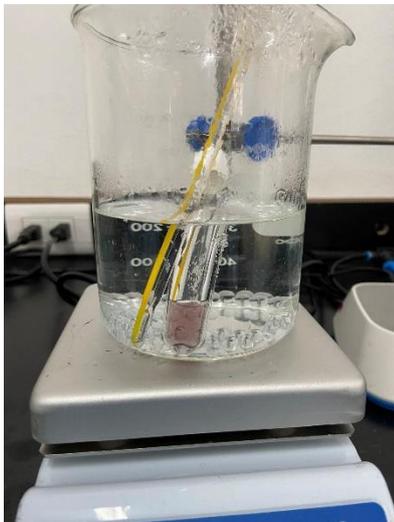
Pruebas de humedad para las muestras.



Pruebas de granulometría para los suelos.



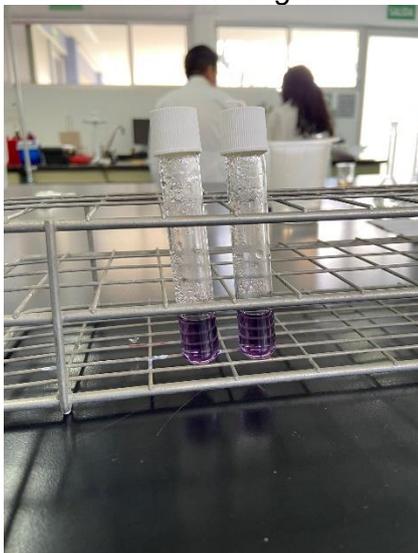
Aplicación de glifosato para C2.



Reacción en baño de María para la determinación del glifosato.



Montaje de la prueba para C2.



Reacción de las muestras.



Curva de absorbancia para las muestras.



Extracción del glifosato del suelo.



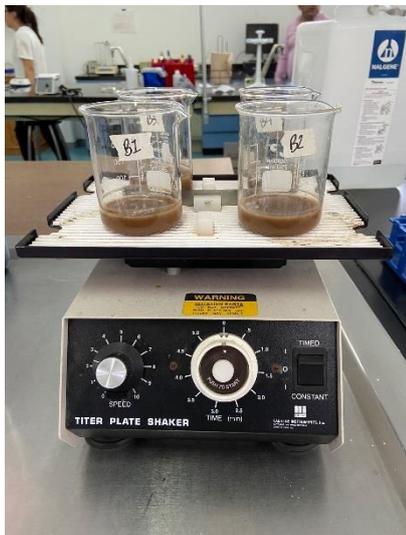
Glifosato comercial utilizado en las pruebas de C2-



Muestras de lixiviado recolectadas.



Muestras de lixiviado recolectadas.



Agitación de muestras en el proceso de extracción de glifosato del suelo.



Reacción de glifosato y molibdeno.



Extracción de muestras en los horizontes



Centrifugación del suelo en el proceso de extracción de glifosato.



Agitación de muestras en el proceso de extracción de glifosato.



Masa de muestra extraídas del suelo.