

eman ta zabal zazu



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

**Modelización de procesos hidrológicos y de
contaminación por nitratos mediante
dos códigos numéricos (SWAT y MOHID).
Cuenca agrícola del río Alegria (País Vasco)**

Memoria de Tesis Doctoral presentada por:

Ane Miren Epelde Beraza

Leioa, 2015



Ane Miren Epelde Beraza

Presenta la siguiente memoria de tesis para optar al grado de Doctora en Ciencias por la Universidad del País Vasco-Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV-EHU):

Modelización de procesos hidrológicos y de contaminación por nitratos mediante dos códigos numéricos (SWAT y MOHID). Cuenca agrícola del río Alegria (País Vasco)

Directores:

Dr. Iñaki Antigüedad Auzmendi

Hidrogeologian Katedraduna

Geodinamika Departamentua

Zientzia eta Teknologia Fakultatea (UPV-EHU)

Dr. José-Miguel Sánchez-Pérez

Catedrático de Investigación

Laboratoire Ecologie Fonctionnelle et Environnement

Centre National de la Recherche Scientifique (Toulouse)

Imagen de portada tomada de: www.free-picture.net

Ama eta aitari,

-Eskerrak-

Lau urte pasa dira jadanik modelizazioaren munduan murgilduko ninduen beka lortu nuenetik. Denbora guzti honetan zehar ikasitako eta bizi izandako esperientziak gogoratzerakoan hainbat pertsonen izenak datozkit burura eta haietariko bakoitzari eskerrak eman nahi dizkiot era batean edo bestean nire bizitzako atal honen parte izanagatik.

Lehenik eta behin, Eusko Jaurlaritzako Nekazaritza Departamentuari eskertzen diot urte hauetan zehar (2011-2015) tesia burutzeko emandako diru laguntza. Bestalde, AguaFlash proiektuari (EU Interreg SUDOE IVB program- SOE1/P2/F146) zeinetan lan honetan erabilitako datuak hartuak izan ziren.

Iñaki Antiguadaderi eskertzen diot nigan izan zuen konfidantza eta Hidrogeologiako talde paregabe honetan sartzeko aukera emana. Eskerrik asko benetan urte hauetan emandako laguntza guztiagatik. Así mismo, agradezco a José-Miguel Sánchez-Pérez y a Sabine Sauvage, por su orientación y apoyo durante todo este tiempo, y también por acogerme con los brazos abiertos en el Ecolab cada vez que lo he necesitado.

Hidrogeologia taldeko kide guztiei ere eskertzen diet denbora guzti honetan emandako laguntza eta aholkuak, ez dira gutxi izan eta! Jesus Uriarte, eskerrik asko beti laguntzeko prest egoteagatik, erakutsi didazun guztiagatik eta edozein zalantza argitzeko esfortsua egiteagatik ere. Tomas Morales, te agradezco el interés mostrado y todas las discusiones en torno al mundo de la hidrogeología. Eta nola ez, hemetik jarraitzen duten edo faltan botatzen ditudan lankide eta lagunei: Barbara, Itsasne, Maite, Miren, Ane, Gonzalo, Imanol eta Myriam. Eskerrik asko zuen laguntza, eztabaida, animo eta azken finean, adiskidetasunagatik. Maite, bihotzez eskertzen dizut emandako laguntza guztia, azken denboraldikoa batez ere. Asko lagundu nauzu jarrera positiboarekin aurrera begiratzen, funtsezkoa dena bizitzaren atal guztietan... beraz,

oraingoan niri dagokit: Animo!! Ez dut inolako zalantzarik primeran egingo duzunik eta! También me gustaría agradecer a Estilita Ruiz, por su apoyo, y a Melissa, la que contribuyó a que aquellos largos viajes y estancias en Toulouse fueran tan agradables.

Asier Egigureni ere eskertu nahi diot beti laguntzeko prest egon izana, formulazio fisikoarekin emandako laguntza eta tesirako beharrezkoak izan diren aholkuak ere.

I thank Ragahavan Srinivasan for all his help during these years and especially for helping me so patiently during my first contact with the numerical models.

Gracias también a Ana Aizpurua y Amaia Ortiz de NEIKER-Tecnalia por toda la información facilitada en relación a la gestión agrícola y su impacto sobre los procesos del suelo.

Por supuesto, agradezco enormemente a toda la gente del grupo Maretec en el Instituto Superior Técnico de Lisboa. A Ramiro Neves, por haberme aceptado en tantas ocasiones en su grupo de investigación dándome la oportunidad de aprender tantísimo. A David Brito y Eduardo Jauch, por toda la ayuda prestada allí, mediante los emails y a través del foro... os estoy infinitamente agradecida. A Frank Braunschweig por toda su asistencia técnica. Y al resto de la gente del Maretec; especialmente, a Lucian, Claudia, Hilda y Francisco, quienes me han hecho sentir como en casa. Y, muy especialmente, a Cristina, mi gran anfitriona en Lisboa y la que me ha enseñado Portugal y sus gentes tan maravillosas. Pela sua ajuda nos momentos mais difíceis e pelas experiências inesquecíveis em Lisboa. Muito obrigada pela sua amizade.

También me gustaría agradecer a toda la gente que he conocido en el Ecolab de Toulouse y con la que he compartido tantos buenos momentos. Especialmente a Youen, Xiaoling, Antoine, Céline, Samouel y Adrien. Y sobre todo a Cyril, Léo, Julie y Ousama. Gracias por todo. Merci pour votre soutien et votre amitié. Vous avez fait que chaque fois que je me rappelle de Toulouse, se dessine sur mon visage un sourire.

Nire lagun guztiei, bereziki, Udane, Goiza, Andrea, Sara, Aroa, Eukene eta Amaiari eskertzen diet denbora guzti honetan emandako animo eta laguntza. Miren eta Martin, egoera dela eta zuek izan zarete hoberen ulertu nauzuenak, eskerrik asko zuei ere. Ez dezagun utzi kafea hartzera joateari eta gure "pintekin" korrika egitera ateratzeari! Mikel, eskerrik asko beti hor egoteagatik. Pilo bat eskertzen dizut zure laguntza guztia, elkarrekin bizi izandako momento onak eta, bereziki, nire momentu txarretan nire penak Skypen bidez entzuteko prest egon izana.

Eta azkenik, niretzako garrantzitsuenak direnei, familiako kideei, eskertzen diet honaino heltzen lagundu izana. Eneko, zu izan zara azken bolada honetan nire agobioak gehien jasan dituen eta animo handienak ematen jakin izan duena zalantzarik gabe. Bihotzez eskertzen dizut momentu oso onetan zein oso txarretan nirekin egoten jakin eta nahi izana. A Belén y Aitite, quienes han sido un ejemplo de superación durante todos estos años y con los que he vivido tan buenos momentos. Aita, ama, nola eskertu nigatik urte guzti hauetan egindakoa! Zuek izan zarete hartu dudak erabaki bakoitzean nirekin egon zaretenak, txikitatik ikastera, ezagutzera eta azken finean, bizitzera bultzatu nauzuenak. Zuen aholku, animo eta "ez etsi"ek lagundu naute tesi hau bukatzen, zuengatik izan ez balitz ze zaila izango zen honarte heltzea... Bioi, eskerrik asko bihotz-bihotzez.

Laburpena

Azken urteetan nekazaritzak jasan duen areagotzeak, zoru eta uren kalitatearen degradazio jarraitua ekarri du, nekazaritza jarduerak esparru batzuetan izaten duten kudeaketa desegokiaren ondorioz. Alde batetik, erabilitako N-ongarri dosi altuek eta, bestetik, ureztatze eta laborantza ohiturek, lixibiazio bidezko nitrogeno galera garrantzitsuak ekarri dituzte, akuiferoetako uren nitrato kontzentrazioa igoz eta azaleko uren eutrofizazioari bidea emanez.

Honek ingurumenari ekarri dion kaltearen gaineko kontzientziazioaz jabetzearekin batera hainbat neurri hartu izan dira azken urteotan, nekazaritzan kaltegarri diren ondorioak murriztearen helburuarekin. Bide honetan, Euskal Herriaren kasuan, 80ko hamarkadatik hona hainbat ikerkuntza proiektu burutu dira nekazaritza handikoa den Alegria ibaiaren arroan (Álava-Araba), jarduera horretatik eratorritako ur kutsadura aztertuz joateko.

Zehazki, Doktoretza Tesi hau arro horretan nekazaritza jarduerak uren kalitatean duten eraginaren modelizazio numerikora dago bideratuta. Helburu honetarako, kode numeriko bi aukeratu dira arroaren modelo integratu bat eraikitzeke eta arroko prozesu hidrologikoak (akuiferoak barne), nekazaritza jarduerari dagozkionak eta mantenugaien eraldatzearekin lotutakoak ere simulatzeko.

Modelizazio honek nekazaritza jardueren aldaketek (lurzoruaren erabilera, N-ongarri dosiak eta ureztatze-era) uren kalitatean eta nitrogenoaren dinamikan duten eragina aztertzeko balioa izan du. Horrela, jarduerok lurrazpiko zein lur-gaineko uretako nitrato kontzentrazioan duten eragina ikertu ahal izan da, bai eta kutsadura arintzeko hartutako neurriak ezartzen direnetik horien efektuak nabarmentzen hasten diren arte pasatu daitezkeen denbora agerian jartzeko ere.

Gerora begira izan litezkeen egoera ezberdin batzuk modelizatu dira, adibide modura, horietan "jarduera onak" ezartzeak izan litzakeen ondorioak aurreikusi nahian. Doktoretza Tesi honetan frogatua denez, erabilitako kode bakoitzak oinarri duen formulazioak, eta modelo bakoitza eraikitzeke aurretik hartu diren onarpenak, bi kodeen bidezko modelizazioak emandako emaitzak, kasuan kasu, desberdinak izatea ekarri du. Beraz, modelizatu orduko, alderdi hauek kontuan izatea funtsezkoa da. Modelizazio numerikoaren mugak eta aukerak gogoan, modeloen erabilera egokia kudeaketarako tresna oso garrantzitsua izan daitekeela ondorioztatu da, bai nekazaritza jardueren errendimendu arloan, bai eta uren kutsadura murrizte alderako planetan ere. Horrela, ikerlan honen gomendio modura, Nekazaritza arloan eskumenak dituen administrazioak ohiko hartu beharko luke modelizazio prozesua, integratua eta jarraitua, jardueren kudeaketa planetan.

Resumen

La intensificación de la agricultura durante las últimas décadas ha acarreado un importante deterioro de la calidad de los suelos y del agua a consecuencia de una gestión agrícola deficiente en diversos aspectos. Por un lado, las altas dosis de fertilizantes nitrogenados, y, por otro, las prácticas de riego o labranza, han supuesto importantes pérdidas de nitrógeno por lixiviación, contribuyendo al aumento de la concentración de nitrato en los acuíferos y a la eutrofización de masas de aguas superficiales.

Mediante la concienciación de este serio problema para el medioambiente, se han ido implementando una serie de normativas con el objetivo de reducir los efectos de una inadecuada gestión agrícola. Así, en el País Vasco se llevan realizando estudios desde la década de los 80 en relación a la contaminación agrícola de origen difuso sobre las aguas superficiales y subterráneas de la cuenca del río Alegria (Álava-Araba).

Concretamente, la presente Tesis Doctoral enfoca el estudio de los impactos de las prácticas agrícolas sobre las aguas a través de la modelización numérica, mediante distintos códigos numéricos que permiten construir modelos integrados considerando los principales procesos a escala de cuenca. Así, los procesos simulados son aquellos relacionados con la hidrología (incluyendo, obviamente, la dinámica del acuífero), las prácticas agrícolas y la transformación de nutrientes.

La modelización numérica ha permitido simular el impacto de los cambios en las prácticas agrícolas (usos del suelo, dosis de fertilizantes y gestión del riego) sobre la calidad de las aguas y la dinámica del nitrógeno del sistema. Esto ha servido para evidenciar el efecto de los cambios sobre la concentración de nitratos de las aguas, subterráneas y superficiales, y también el lapso temporal que puede discurrir entre el inicio de una práctica de mitigación y la puesta en evidencia de una mejora en la calidad de las aguas.

Además, se han construido diferentes escenarios alternativos de buenas prácticas agrícolas con los que se ha podido analizar su impacto sobre las aguas. Tal y como queda demostrado en esta Tesis Doctoral, los procesos considerados por cada código utilizado y las asunciones tomadas en la construcción de cada modelo hacen que los resultados puedan diferir, en menor o mayor medida, por lo que la consideración de estos aspectos es esencial. Teniendo en cuenta las limitaciones y posibilidades de la modelización numérica, se concluye que los modelos, utilizados adecuadamente y con una actualización frecuente, suponen una importante herramienta para optimizar la gestión en términos de producción y de mitigación de la contaminación en cuencas cuyo principal uso es el agrícola. De esto resulta que la administración competente en la materia debería incluir la modelización de forma activa en los planes de gestión agrícola.

Abstract

Agricultural intensification during recent decades has brought an important deterioration of both soil and water quality owing to deficient agricultural management. High fertilizer doses as well as inadequate irrigation and tillage practices, contribute to a high amount of nitrogen leaching from the soil, which implies the increase of nitrate concentration in the aquifers and the eutrophication of the surface water bodies.

Due to the raising awareness about this environmental issue, different laws and regulations have been implemented with the aim of mitigating the negative effects of inappropriate agricultural practices. Thus, since the 80's numerous studies and research programs have been carried out in the Basque Country in order to analyze the surface and groundwater quality in the Alegria River watershed (Álava-Araba).

In particular, this current Thesis work is focused on the numerical modeling of the impact of the agricultural practices on the water quality, for which different modeling approaches were chosen. The selected numerical codes have allowed the creation of integrated models which are able to simulate the main process related to the hydrology, agricultural practices and nutrient cycling at the watershed scale.

The numerical modeling has allowed the simulation of the impact of changes in agricultural practices (land use, fertilization doses and irrigation management) on the water quality and nitrogen dynamics of the system. It has evidenced the effect of these practices on the nitrate concentration of the groundwater and surface water as well as the time lapse sometimes needed since the legislation is established in force until its beneficial effects are seen on the water quality.

Indeed, alternative agricultural scenarios with best management practices have been constructed by the different codes in order to analyze their impact on the water quality. In the current Thesis work it is demonstrated that due to each code considered processes and the assumptions taken during the models' construction, the simulated results can vary in a lower or larger extent, becoming their consideration an essential aspect. Taking into account the numerical modeling limitations and possibilities, it is concluded that models, adequately used and frequently updated) are real useful tools that can help to optimize the crop production and the agricultural related pollution problems in watersheds that are mainly devoted to the agriculture. Hence, the administration authorized in the matter should include modeling studies within the agricultural management plans.

Résumé

L'intensification de l'agriculture au cours des dernières décennies a conduit à une détérioration significative de la qualité des sols et des eaux, à la suite d'une mauvaise gestion agricole. D'une part, de fortes doses d'engrais azotés, et d'autre part des pratiques d'irrigation et de labour inadaptées, ont entraîné d'importantes pertes d'azote par lessivage, contribuant à l'augmentation des concentrations en nitrate dans les aquifères et l'eutrophisation des masses d'eau de surface.

La sensibilisation de la population à ce problème environnemental a conduit à la mise en place d'une série de lois et de réglementations pour atténuer les effets d'une gestion agricole inadéquate. Ainsi, au Pays Basque, de nombreuses études ont été réalisées à partir des années 80 en matière de pollution agricole diffuse des eaux de surface et souterraines du bassin versant de la rivière Alegria (Álava-Araba).

Plus précisément, cette thèse de doctorat est axée sur l'étude des impacts des pratiques agricoles sur les eaux par la modélisation numérique, en utilisant différents codes numériques qui permettent de construire des modèles intégrés tenant compte des principaux processus à l'échelle du bassin versant. Ainsi, les processus simulés sont ceux liés à l'hydrogéologie (en incluant la dynamique des aquifères), l'agronomie et le recyclage des nutriments.

La modélisation numérique a permis de simuler l'impact des changements des pratiques agricoles (utilisation des sols, quantités d'engrais et gestion de l'irrigation) sur la qualité de l'eau et la dynamique de l'azote dans le système. Cela a servi à démontrer l'effet des changements sur les concentrations en nitrate dans les eaux souterraines et également le laps de temps qui peut être nécessaire entre la mise en place d'une mesure d'atténuation de la pollution et la mise en évidence d'une amélioration de la qualité des eaux.

En effet, différents scénarios alternatifs de bonnes pratiques agricoles ont été construits, permettant d'analyser leurs impacts sur les eaux. Il a été démontré dans cette thèse qu'en raison des processus utilisés pour chaque code et des hypothèses formulées dans la construction de chaque modèle, les résultats simulés pouvaient varier de façon plus ou moins importante, de sorte que l'examen de ces différents aspects est essentiel. Compte tenu des avantages et des inconvénients de la modélisation numérique, il a été conclu que les modèles utilisés de façon adéquate et fréquemment actualisés sont des outils importants pour optimiser la gestion en termes de production et d'atténuation de la pollution dans les bassins versants principalement agricoles. Il en découle que les autorités compétentes dans le domaine devraient inclure la modélisation dans les plans de gestion agricoles.

Índice de la memoria

1. ANTECEDENTES	1
1.1 PROBLEMÁTICA RELACIONADA CON LA ACTIVIDAD AGRÍCOLA.....	4
1.1.1 Contaminación por nitratos de procedencia agrícola.....	5
1.2 ECOSISTEMAS AGRÍCOLAS	5
1.2.1 Importancia del suelo en la agricultura.....	5
1.2.2 Composición del suelo.....	7
1.2.2.1 El agua en el suelo.....	7
1.2.2.2 Fracción mineral del suelo	10
1.2.2.3 Fracción orgánica del suelo.....	12
1.2.3 Transformación de nutrientes en el suelo	17
1.2.3.1 Ciclo del nitrógeno.....	17
1.2.3.2 Ciclo del carbono.....	20
1.3 MODELIZACIÓN DE ECOSISTEMAS AGRÍCOLAS	21
1.3.1 Conceptos generales.....	21
1.3.1.1 Terminología.....	21
1.3.1.2 Clasificación.....	23
1.3.1.3 Protocolo de modelización.....	25
1.3.2 Modelización de procesos a nivel de cuenca	27
1.3.2.1 Modelización de la materia orgánica.....	28
1.4 ORGANISATIONAL SETTING OF THE MANUSCRIPT.....	32
1.4.1 General setting	32
1.4.2 Objectives.....	33
1.4.3 Structure of the manuscript.....	34
1.5 REFERENCES	35
2. MATERIALES Y MÉTODOS.....	43
2.1 ZONA DE ESTUDIO	46
2.1.1 Contexto geográfico.....	46
2.1.1.1 Localización.....	46
2.1.1.2 Climatología.....	47
2.1.2 Funcionamiento hidrológico de la cuenca.....	48
2.1.2.1 Marco Hidrogeológico.....	48
2.1.2.2 Descripción edafológica	51
2.1.3 Usos del suelo.....	52
2.1.4 Actividad agrícola	55

2.1.5	Problemática agrícola de la zona de estudio.....	57
2.2	TRATAMIENTO DE DATOS	58
2.2.1	Datos climatológicos	58
2.2.2	Datos de calidad.....	60
2.2.3	Cálculo de carga mediante Load Estimator	62
2.3	NUMERICAL MODELING	62
2.3.1	Description of the codes.....	62
2.3.1.1	Soil and Water Assessment Tool (SWAT).....	62
2.3.1.2	Modelo Hidrodinámico (MOHID).....	78
2.3.2	Evaluation of the results.....	95
2.3.3	Sensitivity analysis	96
2.4	MODELIZACIÓN DE LA CUENCA DEL RÍO ALEGRIA.....	98
2.4.1	Set-up de los modelos SWAT y caracterización del sistema.....	98
2.4.1.1	Información meteorológica	100
2.4.1.2	Información edafológica.....	100
2.4.1.3	Información agronómica	100
2.4.1.4	Condiciones iniciales.....	106
2.4.2	Calibración de los modelos SWAT.....	107
2.4.2.1	Calibración de los parámetros relacionados con los procesos hidrológicos.....	107
2.4.2.2	Calibración de los parámetros relacionados con la calidad del agua... 111	
2.4.3	Set-up del modelo MOHID y caracterización del sistema	114
2.4.3.1	Información meteorológica	115
2.4.3.2	Caracterización del medio poroso	115
2.4.3.3	Información agronómica	117
2.4.3.4	Condiciones iniciales.....	120
2.4.4	Calibración del modelo MOHID	121
2.4.4.1	Calibración de los parámetros relacionados con los procesos hidrológicos.....	122
2.4.4.2	Calibración de los parámetros relacionados con la calidad del agua... 132	
2.5	CONSTRUCCIÓN DE LOS ESCENARIOS CON BUENAS PRÁCTICAS AGRÍCOLAS.....	135
2.6	REFERENCES	137
3.	MODELIZACIÓN INTEGRADA DE PROCESOS HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD MEDIANTE UN MODELO CONCEPTUAL.....	143
3.1	RESULTADOS Y DISCUSIÓN: MODEZACIÓN DEL IMPACTO DE LAS PRÁCTICAS AGRÍCOLAS CON SWAT	146

3.1.1	Introduction.....	146
3.1.2	Materials and Methods	147
3.1.2.1	Study area.....	147
3.1.2.2	SWAT model description	149
3.1.2.3	Input data for SWAT.....	149
3.1.2.4	Model Evaluation	152
3.1.2.5	Data used for calibration and validation.....	152
3.1.3	Results and Discussion	156
3.1.3.1	Hydrology	156
3.1.3.2	Crop Yield	158
3.1.3.3	Nutrients.....	158
3.1.4	Conclusions	168
3.1.5	Corrección de errores numéricos.....	169
3.2	RESULTADOS Y DISCUSIÓN: MODELIZACIÓN DEL NIVEL FREÁTICO CON SWAT	171
3.3	RESULTADOS Y DISCUSIÓN: REPRESENTACIÓN DE LA VARIABILIDAD ESPACIAL CON SWAT	172
3.4	CONCLUSIONES SOBRE LA MODELIZACIÓN CON SWAT	175
3.5	REFERENCES	177
4.	SIMULACIÓN DE PROCESOS HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD MEDIANTE DIFERENTES APROXIMACIONES NUMÉRICAS	181
4.1	NITROGEN TRANSPORT AND TURNOVER MODELING AT THE WATERSHED SCALE IN A NITRATE VULNERABLE ZONE	184
4.1.1	Introduction.....	184
4.1.2	Materials and Methods	186
4.1.2.1	Study area.....	186
4.1.2.2	Model comparison.....	187
4.1.2.3	Comparison of model output	189
4.1.2.4	Preparation of input data for the models.....	190
4.1.2.5	Model calibration and parameterization.....	191
4.1.2.6	Assessment of model performance	195
4.1.3	Results and Discussion	196
4.1.3.1	Hydrological processes.....	196
4.1.3.2	Nutrient transport and transformation processes	200
4.1.3.3	Natural attenuation.....	204
4.1.3.4	Uncertainty of results.....	208
4.1.4	Conclusions	209

4.2	RESULTADOS COMPLEMENTARIOS DEL MODELO MOHID Y DISCUSIÓN..	210
4.2.1	Simulación de la superficie piezométrica	210
4.2.2	Simulación de la producción de los cultivos.....	211
4.2.3	Análisis de sensibilidad	214
4.3	CONCLUSIONES SOBRE LA MODELIZACIÓN MEDIANTE DIFERENTES APROXIMACIONES NUMÉRICAS	217
4.4	REFERENCES	219
5.	BEST MANAGEMENT PRACTICES SCENARIOS SIMULATION	223
5.1	RESULTS OF THE SWAT MODELS	226
5.1.1	Water export.....	226
5.1.2	N load export.....	226
5.1.3	Groundwater nitrate concentration.....	226
5.1.4	Crop yield	227
5.2	RESULTS OF THE MOHID MODELS	228
5.2.1	Water export.....	228
5.2.2	N load export.....	228
5.2.3	Groundwater nitrate concentration.....	228
5.2.4	Crop yield	229
5.3	COMPARISON OF THE RESULTS AND DISCUSSION.....	230
5.4	REFERENCES	232
6.	DISCUSSION AND CONCLUSIONS.....	233
6.1	INTEGRATED DISCUSSION	236
6.1.1	Implications of the employed methodology	236
6.1.2	The performance of the calibrated models.....	239
6.2	CONCLUSIONS AND PERSPECTIVE WORK.....	242
6.2.1	Principal conclusions	242
6.2.2	Perspective work and recommendations	244

ANEXO I: Parámetros del modelo MOHID

ANEXO II: Publication: “Application of SWAT model to assess the impact of agricultural management practices changes in water quality”

ANEXO III: Spatial variability representation of the MOHID model results

Índice de las figuras

Figura 1-1. Extensión de la tierra dedicada a la agricultura (Foley et al., 2005).....	4
Figura 1-2. Perfil general del suelo y los principales horizontes (www.nrcs.usda.gov).....	6
Figura 1-3. Composición media de un suelo agrícola (Reicosky, 2007).....	7
Figura 1-4. Formas de agua en el suelo (www.soils.persianguig.com).....	9
Figura 1-5. Estado de agua en el suelo (modificado de O'Geen, 2012).	9
Figura 1-6. Relación entre el contenido volumétrico de agua y los estados FC y WP para diferentes clases texturales (Gurevitch et al., 2002).....	10
Figure 1-7. Triángulo textural (www.nrcs.usda.gov).	11
Figura 1-8. Funciones principales de la materia orgánica del suelo (www.boprc.govt.nz).....	12
Figura 1-9. Composición de la materia orgánica del suelo (basado en Porta et al., 1994).....	13
Figura 1-10. Principales procesos de la materia orgánica (Porta et al., 1994).	14
Figura 1-11. Distribución media de carbono orgánico particulado en zonas agrícolas (basado en Jobbagy, 2000).....	16
Figura 1-12. Representación del ciclo del Nitrógeno (Hiscock et al., 1991).	18
Figura 1-13. Representación del ciclo del Carbono (Johnson, 1995).....	21
Figura 1-14. Clasificación de los modelos matemáticos.	23
Figura 1-15. Los principales pasos durante la modelización hidrológica (Refsgaard, 1997).	25
Figura 1-16. Proceso de autocalibración (Dent et al., 2004).	26
Figura 1-17. Precisión y confianza de los modelos hidrológicos y de calidad (D'Arcy y Frost, 2001).....	27
Figura 2-1. Localización geográfica de la zona de estudio, así como la cuenca del río Alegria, el acuífero Cuaternario (Sector Occidental, Oriental y Dulantzi) y los puntos de control (piezómetros, estación de aforos y de muestreo químico, y estaciones meteorológicas).	46
Figure 2-2. Precipitación anual media (estaciones de Alegria, Arkaute y Kapildui) relativa al valor medio anual (626 mm).	47
Figura 2-3. Mapa de espesores del Acuífero Cuaternario de Vitoria-Gasteiz (Arrate, 1997).....	48
Figura 2-4. Mapa de isopiezas desarrollado por Arrate, 1997.....	49
Figura 2-5. Evolución espacio-temporal de los niveles piezométricos medidos en los 15 puntos de control pertenecientes a la Red Piezométrica de la Diputación Foral de Alava (DFA).	50
Figura 2-6. Perfiles transversales de los cauces en la cuenca del Río Alegria (Cerro, 2013).	51
Figura 2-7. Mapa de suelos digitalizado a partir de Iñiguez (1980).....	52
Figura 2-8. Distribución de los usos del suelo durante el año 2008.	54
Figura 2-9. Ocupación agrícola en la zona de estudio durante el año 2008.....	54
Figura 2-10. Fertilización nitrogenada recomendada según el código de buenas prácticas agrarias y habitual (Cerro, 2013).	55
Figura 2-11. Itinerario técnico general del los principales cultivos de la zona de estudio (Cerro, 2013).....	56
Figura 2-12. Relación temporal entre los datos de precipitación de las estaciones y dispersión entre los datos de las estaciones de A) Arkaute, B) Alegria y C) Kapildui con respecto a los datos de la estación de Foronda.	59
Figura 2-13. Dispersión entre los datos de temperatura máxima y mínima de las estaciones de A) Arkaute, B) Alegria y C) Kapildui con respecto a los datos de la estación de Foronda.	60
Figura 2-14. A) Datos empleados para la conversión; B) Dispersión de los datos y ecuación empleada.	61
Figure 2-15. Representation of the spatial distribution of the SWAT model (Boithias, 2012).	63
Figure 2-16. Hydrological processes considered by SWAT (www.epa.ohio.gov).....	64
Figure 2-17. Different N pools and main processes that move the N in and out of pools (Neitsch et al., 2009).	71
Figure 2-18. Main hydrological processes considered by the MOHID code (www.mohid.com).	78

Figure 2-19. MOHID code structure and location of the libraries, modules and executables (www.mohid.com).....	80
Figure 2-20. Representation of the spatial discretization process.....	81
Figure 2-21. Schematic representation of flow between adjacent cells.....	85
Figure 2-22. Water table level conceptualization.	86
Figure 2-23. The relationship between river and aquifer.....	87
Figure 2-24. Channel morphology definition; H: Height, W _T : Top length and W _B : Bottom length.....	88
Figure 2-25. Representation of the K _c and the crop development relationship (Allen et al., 1998).....	90
Figure 2-26. Water stress factor according to the pressure head (Jong van Lier et al., 2008).....	91
Figure 2-27. N transformation processes and pools considered by the Sediment Quality module.	93
Figura 2-28. Mapas de entrada empleados por el código SWAT para establecer la discretización espacial del modelo. Los códigos de los suelos quedan definidos en la Tabla 2-8.....	99
Figura 2-29. Definición de la red de drenaje y la división en subcuencas.....	99
Figura 2-30. Uso de suelo correspondiente al año 2008.	101
Figura 2-31. Distribución de los usos del suelo durante los años de simulación. Los códigos correspondientes a los usos quedan definidos en la Figura 2-30.A partir del año 2000 la extensión sigue la evolución definida en la Tabla 2-11.....	103
Figura 2-32. Rotaciones y principales prácticas agrícolas consideradas en el modelo.	104
Figura 2-33. Dosis de fertilizante aplicada en fondo y cobertera a cada cultivo durante los cuatro periodos de fertilización.	105
Figura 2-34. Delimitación de la zona de estudio y la red de drenaje sobre el modelo digital del terreno.....	114
Figura 2-35. Mapa de texturas obtenido mediante la metodología definida en el apartado 2.4.1.2. <i>Información edafológica</i>	115
Figura 2-36. Mapa de valores del coeficiente de Manning.	116
Figura 2-37. Mapa de impermeabilidad.....	117
Figura 2-38. Mapa de base empleado en el modelo MOHID (vegetation map).	118
Figura 2-39. Cuantificación del número de celdas atribuidas a cada tipo de vegetación.....	119
Figura 2-40. Mapa de IDs empleado en el modelo MOHID (ID map).	119
Figura 2-41. Espesor del medio poroso tras ser reorganizado en base a la discretización vertical.....	123
Figura 2-42. Representación de la discretización espacial del modelo.....	124
Figura 2-43. Mapa de zonas de conductividad hidráulica saturada del Horizonte 2 (material acuífero).	126
Figura 2-44. Caudal simulado por tres modelos que difieren en cuanto a la conductividad hidráulica. El modelo K _s Suelos, en rojo, representa un aumento del 20% del valor K _s de los suelos y el modelo K _s Acuífero, en verde, representa un aumento del 20% del valor K _s del acuífero.....	126
Figura 2-45. Caudal simulado por tres modelos que difieren en cuanto al factor de la conductividad hidráulica horizontal. La línea verde representa un descenso del valor de K _h (20) y la roja, un aumento (30) respecto a la simulación de base (25).	127
Figura 2-46. Valores del coeficiente de cultivo empleados en el modelo.....	130
Figura 2-47. Evapotranspiración mensual simulada por los modelos SWAT y MOHID.....	131
Figura 2-48. Clasificación de las Buenas Prácticas Agrícolas (Logan, 1993).....	136
Figure 3-1. Localization of the study area and positions of gauging and meteorological stations in the Alegria River watershed.....	148
Figure 3-2. Evolution of top (first) and dressing (second) fertilization (kg N ha ⁻¹) during the simulated period. Nitrate concentration considered in irrigation water is shown on the secondary y-axis.....	152
Figure 3-3. Paired box plots reporting average monthly rain data from three meteorological stations and corresponding to the periods 1990-1999 and 2000-2011 periods. Median, 25 th and 75 th percentiles, and	

minimum and maximum values are shown. The table provides statistical information (mean, maximum, minimum and percentage) about the seasonal precipitation and the graph represents seasonal precipitation average in each of the meteorological stations considered in the study.156

Figure 3-4. Observed and simulated daily discharge at the Alegria watershed outlet ($\text{m}^3 \text{ day}^{-1}$). Daily and monthly statistical values are provided for calibration and validation periods.157

Figure 3-5. Simulated annual crop yield ($\text{t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$), mean precipitation (mm year^{-1}) and mean solar radiation ($\text{MJm}^2\text{day}^{-1}$).....159

Figure 3-6. Spatial distribution of simulated nitrogen input, output and surplus ($\text{kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$) for the periods 1990-1999 and 2000-2011.162

Figure 3-7. Relationship between annual precipitation and annual N output for the periods 1990-1999 and 2000-2011.163

Figure 3-8. Observed and simulated monthly average nitrogen load (kg N d^{-1}) at the Alegria watershed outlet. Daily and monthly statistical values are provided for calibration and validation periods.163

Figure 3-9. Observed and simulated monthly average nitrate concentration ($\text{mg NO}_3 \text{ L}^{-1}$) at the Alegria watershed outlet.164

Figure 3-10. Simulated annual evolution of groundwater NO_3 concentration ($\text{mg NO}_3 \text{ L}^{-1}$) (considering all the HRUs of the entire watershed and only the agricultural HRUs) and annual fertilizer input (t year^{-1}). High and low fertilization periods (1990-1999 and 2000-2011, respectively) are highlighted. The dashed (red) line indicates the nitrate limit set by the European Commission and the arrow the simulated trend of annual N surplus.166

Figure 3-11. Simulated annual stream flow contribution by surface, lateral and groundwater pathways. High and low fertilization periods (1990-1999 and 2000-2011, respectively) are highlighted. Annual precipitation (mm year^{-1}), N surplus ($\text{kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$), N export (t N year^{-1}) and stream flow NO_3 concentration ($\text{mg NO}_3 \text{ L}^{-1}$) are also shown.166

Figura 3-12. Datos observados y simulados de la variación mensual de nivel (m) en el pozo Arcaya.....172

Figura 3-13. Simulación de la producción anual de los cultivos ($\text{t ha}^{-1} \text{ año}^{-1}$) durante los años 2009, 2010 y 2011. Los puntos indican los valores atípicos para cada caso.174

Figure 4-1. Localization of the study area, meteorological and gauging stations and wells.186

Figure 4-2. Soil texture, aquifer transmissivity zones and porous media thickness maps used in the MOHID model.194

Figure 4-3. Observed and simulated discharges at the Alegria River watershed outlet (SWAT (top) and MOHID (bottom) simulations are represented in red and green, respectively).198

Figure 4-4. Relative water yield simulated by the SWAT and MOHID models.198

Figure 4-5. Observed and MOHID simulated water table levels on different wells.....199

Figure 4-6. Observed and simulated nitrogen daily load exportation at the Alegria River watershed outlet (SWAT and MOHID simulations are represented in red and green, respectively).....201

Figure 4-7. Observed and simulated monthly load exportation at the Alegria River watershed outlet (SWAT and MOHID simulations are represented with squares and triangles, respectively).....201

Figure 4-8. Observed (black dots), SWAT (red line) and MOHID (green line) simulated nitrogen concentrations in Alegria River. Fertilization application dates are indicated with black arrows.202

Figure 4-9. Relationships between observed and simulated (SWAT in red; MOHID in blue) river nitrogen concentrations ($\text{mg N-NO}_3 \text{ l}^{-1}$) during the period 28/10/09 to 07/12/11.202

Figure 4-10. Observed, SWAT and MOHID simulated nitrogen concentration ($\text{mg N-NO}_3 \text{ l}^{-1}$) in the groundwater.....203

Figure 4-11. MOHID simulated mean, maximum and minimum nitrogen concentration ($\text{mg N-NO}_3 \text{ l}^{-1}$) for different depths of the model considering all of the well locations shown in Figure 4-1.204

Figure 4-12. HRU weighted sub-basin denitrification rates simulated by SWAT.205

Figure 4-13. Denitrification rates simulated by MOHID.205

Figure 4-14. Precipitation considered by each model (mm day^{-1}) and simulated denitrification of the SWAT (a) and MOHID (b) models ($\text{kg N ha}^{-1} \text{ day}^{-1}$) at two different model sites (discharge zone in green and center of the watershed in red).	207
Figura 4-15. Mapa de isopiezas del Acuífero Cuaternario en condiciones de aguas altas (2009-01-28).	211
Figura 4-16. Mapa de isopiezas del Acuífero Cuaternario en condiciones de aguas bajas (2009-09-19).....	211
Figura 4-17. Simulación de la producción anual de los cultivos ($\text{t ha}^{-1} \text{ año}^{-1}$) durante los años 2009, 2010 y 2011. Los puntos indican los valores atípicos para cada caso.	212
Figura 4-18. Producción anual (t ha^{-1}) de los cultivos considerados en el modelo MOHID.	213
Figure 5-1. Base model (SWAT BASE) and two BMP scenarios (SWAT FERT and SWAT USO) simulated monthly nitrate concentration in the groundwater. An enlargement of the last four years (2008-2011) is shown in the center of the figure.	227
Figure 5-2. Base model (MOHID BASE) and two BMP scenarios (MOHID FERT and MOHID USO) simulated monthly nitrate concentration in the groundwater.	229

Índice de las tablas

Tabla 2-1. Contenido de carbono orgánico en una parcela agrícola (Muñoz, 2012).	52
Tabla 2-2. Usos del suelo y extensión ocupada en la zona de estudio.	53
Tabla 2-3. Extensión de la ocupación agrícola en la zona de estudio durante el año 2008.	54
Tabla 2-4. Características de las estaciones meteorológicas.	58
Tabla 2-5. Ecuaciones empleadas para la conversión de datos.	59
Table 2-6. Algorithms used by the SWAT code (Neitsch et al., 2009).	63
Table 2-7. Mineral and Organic nutrient pools considered by the Sediment Quality module.	93
Tabla 2-8. Caracterización de los suelos (Ks: Conductividad hidráulica saturada q ; Densidad aparente; y AWC: Contenido hídrico disponible).	100
Tabla 2-9. Rotaciones consideradas por el modelo SWAT.	102
Tabla 2-10. Asignación de los códigos de las rotaciones a las HRUs agrícolas del modelo. Los códigos "Uso" quedan definidos en la Figura 2-30.	102
Tabla 2-11. Extensión (km ²) simulada durante los años consecutivos a partir del año 2000.	103
Tabla 2-12. Concentración (mg NO ₃ l ⁻¹) anual considerada para el agua subterránea y la fertilización (kg N ha ⁻¹) equivalente a 10 mm de riego.	106
Tabla 2-13. Valores iniciales establecidos en los modelos SWAT.	106
Tabla 2-14. Descripción y valores calibrados de los parámetros hidrológicos.	108
Tabla 2-15. Parámetros considerados durante la autocalibración y los rangos de los valores.	110
Tabla 2-16. Valores de los parámetros obtenidos por autocalibración.	111
Tabla 2-17. Descripción y valores calibrados de los parámetros relacionados con el nitrógeno.	112
Tabla 2-18. Parámetros hidráulicos de las clases texturales (Θ_s : contenido hídrico en condiciones saturadas; Θ_r : contenido hídrico residual; n y α : parámetros de forma de van Genuchten; Ks: Conductividad hidráulica saturada; y q : densidad aparente).	116
Tabla 2-19. Características de las capas que definen la discretización vertical del modelo.	116
Tabla 2-20. Desglose de las alternativas consideradas durante la definición de las rotaciones.	118
Tabla 2-21. Extensión anual ocupada por cada cultivo según la rotación establecida.	119
Tabla 2-22. Valores de succión de Feddes (Feddes y Raats, 2004).	120
Tabla 2-23. Valores iniciales establecidos en el modelo MOHID.	121
Tabla 2-24. Características morfológicas de la red de drenaje del modelo.	125
Tabla 2-25. Valores de transmisividad (T) y espesores (b) obtenidos para las zonas propuestas por Arrate (1997) y el rango de conductividad hidráulica (K) y el valor medio empleado.	125
Tabla 2-26. Valores mensuales del Kc empleados en el modelo.	129
Tabla 2-27. Valores mensuales de la evapotranspiración de referencia (ET ₀), los días entre episodios lluviosos (DBR) y el valor calculado del coeficiente de cultivo (Kc).	131
Tabla 2-28. Valores del Coeficiente de Manning empleados en el modelo.	132
Tabla 2-29. Parámetros relacionados con el proceso de desnitrificación.	133
Table 3-1. Land-use classification in the Alegria River watershed.	148
Table 3-2. Soil classes and main characteristics. ROccl: Ochric Rendzina; ROCCrc: Ochric Rendzina with Calcic Cambisol; CCcvc, Ccrrc, CCcv: Calcic Cambisol,; VCV: Vertisol with Vertic Cambisol (1 and 2, top and bottom layers, respectively); CCvc: Calcic Cambisol with Vertic Cambiso; CV: Vertic Cambisol; and, Lulro: Ortic Luvisol.	150
Table 3-3. Crop cycles and management practices.	151
Table 3-4. Main variables used for sensitivity and calibration in SWAT.	154

Table 3-5. Statistical summary for streamflow and nitrates.....	158
Table 3-6. Soil system N budget for cultivated lands in the Alegria River watershed (annual average values and standard deviation are given). Values are expressed per hectare of cultivated land (kg N ha ⁻¹ year ⁻¹).....	160
Table 3-7. Soil system N budget for the Alegria River watershed (annual seasonal average values and standard deviation are given). Values are expressed as mass net values (t N year ⁻¹).....	161
Table 3-8. Correlation matrix of simulated variables obtained by SWAT model. ** Correlation significant at p = 0.01 level, * significant at p = 0.05 level. Prec: precipitation, SW: surface contribution, LW: lateral contribution, GW: groundwater contribution, Fert: fertilization, ΔN: N surplus, GW conc: groundwater concentration, River conc.: river concentration.	168
Tabla 3-9. Valores estadísticos de la simulación del caudal y carga de N del segundo modelo SWAT (Cal. Corresponde al proceso de calibración; Val. Corresponde al proceso de validación).	170
Tabla 3-10. Promedio anual de los flujos de N simulados (kg N ha ⁻¹ año ⁻¹) para el periodo 1-Ene-2009/31-Dic-2011.	171
Tabla 3-11. Valores estadísticos de las tres simulaciones obtenidas mediante auto calibración.....	171
Tabla 3-12. Valores estadísticos de la simulación del caudal y carga de N del cuarto modelo SWAT.....	173
Tabla 3-13. Promedio anual de los flujos de N simulados (kg N ha ⁻¹ año ⁻¹) para el periodo 2009-2011.	173
Table 4-1. Management practices considered in the models.	191
Table 4-2. Soil classes and main characteristics defined for SWAT. ROccl: Ochric Rendzina; ROCCrc: Ochric Rendzina with Calcic Cambisol; CCcvc, Crcorc, CCcv: Calcic Cambisols; VCV: Vertisol with Vertic Cambisol (1 and 2, top and bottom layers, respectively); CCCV: Calcic Cambisol with Vertic Cambisol; CV: Vertic Cambisol; Lulro: Ortic Luvisol.....	192
Table 4-3. Main variables used for sensitivity and calibration in SWAT.....	193
Table 4-4. Soil properties defined for the MOHID model.....	193
Table 4-5. Saturated hydraulic conductivity of the transmissivity zones defined in the MOHID model.....	194
Table 4-6. Crop coefficient values defined for the MOHID model.....	195
Table 4-7. Water quality parameters and initial values used in the MOHID model.....	195
Table 4-8. General water balance and discharge summary for the period 21/10/09 to 31/12/11. Values in bold correspond to the annual mean of the period 01/01/09 to 31/12/11 (a, b and c correspond to the Alegria, Arkaute and Kapildui meteorological stations, respectively).....	197
Tabla 4-9. Análisis de sensibilidad de los parámetros hidrológicos y de calidad de las aguas. Δ: variación del parámetro con respecto al modelo base (%); E: volumen de agua exportada (mm); NF: promedio de la cota del nivel freático en el pozo Zurbano-13 (m); Load: exportación de carga de N (t); N-NO ₃ conc: promedio de la concentración de nitratos en el río (mgN-NO ₃ l ⁻¹); Denit: promedio anual de la desnitrificación (kg N ha ⁻¹ año ⁻¹); R ² : coeficiente de determinación (-); NSE: índice estadístico Nash-Sutcliffe (-); y, PBIAS: BIAS (%).Todas las variables son calculadas para el periodo 1-Ene-2009/31-Dic-2011, los índices estadísticos relacionados con el caudal y nitratos son calculados para el periodo 21-Oct-2009/31-Dic-2011 y 28-Oct-2009/17-Jun-2011, respectivamente.....	216
Table 5-1. SWAT simulated water export (hm ³), N load export (t) and annual mean crop yield (t ha ⁻¹) during the period 2009-2011 by the different scenarios.	226
Table 5-2. MOHID simulated water export (hm ³), N load export (t) and annual mean crop yield (t ha ⁻¹) during the period 2009-2011 by the different scenarios.	228
Table 6-1. Observed and simulated water export (hm ³) for the period 21-Oct-2009/ 31-Dec-2011 and the daily NSE statistical index for calibration and validation periods.....	240
Table 6-2. Simulated evapotranspiration and ET/IN ratio by different models for the period 2009-2011 (a, b and c correspond to the Alegria, Arkaute and Kapildui meteorological stations, respectively).	241
Table 6-3. Observed and simulated N load export (t) for the period 28-Oct-2009/ 17-Jun-2011 and the daily NSE statistical index for calibration and validation periods. Values in brackets correspond to statistical indices obtained by the comparison of simulated load against load obtained by simulated discharge.	241

Abreviaturas

AWC	Agua disponible; Available Water Content
b	Espesor saturado
CET ₀	Evapotranspiración de referencia acumulada
CO	Carbono Orgánico
DBR	Días entre episodios lluviosos
DFA	Diputación Foral de Alava
DOC	Carbono orgánico disuelto; Dissolved Organic Carbon
DT	Paso temporal; Time Step
Ep	Evaporación potencial
Er	Evaporación real
ET	Evapotranspiración
ET ₀	Evapotranspiración de referencia
ETc	Evapotranspiración del cultivo
FC	Capacidad de campo; Field Capacity
HRU	Unidad de respuesta hidrológica; Hydrological Response Unit
K(θ)	Conductividad hidráulica no saturada
K	Capa vertical componente del modelo MOHID
Kc	Coefficiente del cultivo
Kh	Factor de conductividad hidráulica horizontal
Ks	Conductividad hidráulica saturada
LAI	Índice de Área Foliar; Leaf Area Index
MDB	Mapa digital de la base del medio poroso
MDT	Mapa digital del terreno
MO	Materia Orgánica
MOD	Materia orgánica disuelta
MOP	Materia orgánica particulada
POC	Carbono orgánico particulado; Particulate Organic Carbon
PTF	Funciones de pedotransferencia; Pedotransfer Functions
S	Grado de saturación
S _s	Coefficiente de almacenamiento

T	Transmisividad
T_p	Transpiración potencial
T_r	Transpiración real
V_e	Volumen de poros interconectados
V_p	Volumen de poros
V_t	Volumen total
V_w	Volumen de agua
WP	Punto de marchitez; Wilting Point
Θ	Contenido volumétrico de humedad
Θ_{FC}	Contenido hídrico en condiciones de capacidad de campo
Θ_r	Contenido hídrico residual
Θ_{rel}	Contenido hídrico normalizado; Relative water content
Θ_s	Contenido hídrico saturado
ρ	Densidad aparente; Bulk (dry) density
ϕ	Porosidad total
ϕ_e	Porosidad eficaz

1.



ANTECEDENTES

- 1.1. PROBLEMÁTICA RELACIONADA CON LA ACTIVIDAD AGRÍCOLA
- 1.2. ECOSISTEMAS AGRÍCOLAS
- 1.3. MODELIZACIÓN DE ECOSISTEMAS AGRÍCOLAS
- 1.4. ORGANISATIONAL SETTING OF THE MANUSCRIPT

1. ANTECEDENTES

El presente capítulo es una introducción general al problema tratado en este estudio. Se realiza una descripción de la problemática relacionada con la actividad agrícola durante las últimas décadas, enfocando especial interés hacia la contaminación por nitratos que es, efectivamente, objeto de estudio de la presente Tesis Doctoral.

Se describen, también, los ecosistemas agrícolas y sus características principales, pues su adecuada comprensión puede repercutir sobre la caracterización del sistema descrita en el siguiente apartado. Así, se describen los suelos, su composición y las principales transformaciones que ocurren en ellos en relación a los nutrientes contemplados en esta Tesis Doctoral: el carbono y el nitrógeno.

Para finalizar, se hace una introducción a la modelización numérica de los ecosistemas agrícolas. Se destacan los conceptos generales y el proceso de modelización, así como también se detallan los códigos más empleados para modelizar los procesos a nivel de cuenca y, en concreto, la degradación de la materia orgánica mediante diferentes aproximaciones numéricas.

1.1. PROBLEMÁTICA RELACIONADA CON LA ACTIVIDAD AGRÍCOLA

La agricultura ha sido el uso de suelo más extendido en Europa, llegando a cubrir el doble que la extensión forestal y aproximadamente diez veces más que la extensión urbana durante las últimas décadas (EEA, 2005). Concretamente, en la Figura 1-1 se puede observar el porcentaje de suelo dedicado a la agricultura a nivel mundial para el año 2005. Durante las últimas décadas, especialmente durante los años 70 y 80, la tendencia hacia una agricultura más intensiva e industrializada trajo consigo diversos problemas medioambientales, entre los cuales destacan las emisiones de diferentes compuestos a la atmósfera y agua, el impacto sobre la calidad y cantidad de aguas superficiales y subterráneas, la erosión del suelo, la deforestación, la contribución al efecto invernadero, la contaminación por pesticidas y la pérdida de biodiversidad (Doran y Parkin, 1994).

Desde que todos estos problemas fueron identificados, se han llevado a cabo numerosos estudios con el fin de entender las relaciones de causa-efecto de diversas prácticas agrícolas sobre los ecosistemas. De esta forma, y especialmente durante los últimos años, se está dedicando un gran esfuerzo a identificar las medidas que ayuden a disminuir el impacto de la agricultura, la cual, todavía, está sufriendo una importante expansión debido a la necesidad de satisfacer la demanda alimentaria (Foley et al., 2011; Chen et al., 2014). Si bien es cierto que en Europa la calidad de las aguas está mejorando progresivamente debido a las prácticas más restrictivas asociadas al sector agrícola (Esteban y Albiac, 2012), la **contaminación por nitratos** en aguas subterráneas y superficiales todavía representa un problema con una fuerte afección de la biodiversidad de los ecosistemas (UPI, 2013).

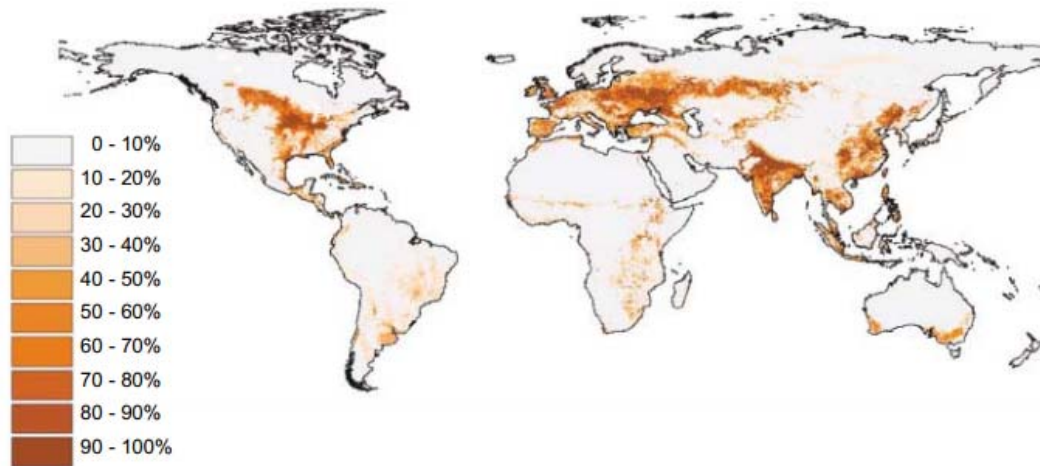


Figura 1-1. Extensión de la tierra dedicada a la agricultura (Foley et al., 2005).

En la actualidad, uno de los métodos más populares para estudiar la contaminación procedente de las prácticas agrícolas es, sin duda, la **modelización numérica**. Precisamente, gracias a los avances en la tecnología y la implementación de sistemas de computación más rápidos, con más memoria y más baratos, esta metodología sufrió durante la década de los 90

un amplio desarrollo (Konikow, 1996) y los códigos creados entonces se fueron refinando con el paso de los años, dando lugar a los complejos sistemas de modelización que existen hoy en día.

Los estudios llevados a cabo mediante la modelización de sistemas naturales han sido considerados de gran utilidad para analizar los impactos de la agricultura sobre las aguas, ya que dan la posibilidad de cuantificar los efectos y los costes de distintas prácticas agrícolas. Por ello, no sólo resultan útiles para los gestores sino que también para los propios agricultores. Esta técnica ha sido empleada en estudios muy diversos (Walls, 2006) y en la actualidad, de acuerdo con la literatura científica, se estima que la contaminación por nitratos en Europa está siendo abarcada mediante diez códigos diferentes que difieren entre sí por su complejidad (Bouraoui y Grizzetti, 2014).

1.1.1. Contaminación por nitratos de procedencia agrícola

La agricultura tiene una gran influencia sobre la composición del agua que recarga los acuíferos y las masas de agua superficiales, acarreado, fundamentalmente, dos problemas principales. Por un lado, el efecto ecológico sobre las aguas superficiales, las cuales, debido a un alto aporte de nutrientes inorgánicos, son **eutrofizadas** con el consecuente descenso de su biodiversidad (Howarth et al., 2000; Deflandre y Jarvie, 2006). Por otro, el deterioro de la calidad del agua potable con consecuentes **efectos sobre la salud** humana (Fan y Steinberg, 1996), siendo la contaminación por nitratos uno de los más estudiados debido, fundamentalmente, a su afección a los infantes (Johnson et al., 1987).

Con el objetivo de controlar la contaminación y mejorar la calidad de las aguas, en el año 1991 la Unión Europea desarrolló la **Directiva de nitratos** (91/676/EEC). Gracias a los programas de acción contemplados en la misma y en los posteriores decretos establecidos en relación a este tema, la calidad de las aguas superficiales y subterráneas permanece estable o está mejorando. Por este motivo todavía se considera necesario intensificar los esfuerzos en relación con el control y establecer programas de acción más estrictos.

1.2. ECOSISTEMAS AGRÍCOLAS

1.2.1. Importancia del suelo en la agricultura

El suelo es un gran recurso al que la agricultura está estrechamente ligada y del cual depende, esencialmente, su sostenibilidad. En efecto, el interés por el conocimiento del suelo se ha ido desarrollando a medida que se avanza en los estudios agrícolas.

Se denomina **suelo** a la parte no consolidada y superficial de la corteza terrestre, cuyo desarrollo estando fuertemente condicionado por factores como la litología de la roca madre, el clima, la fauna, la geomorfología y el tiempo (Jenny, 1941). Su composición puede ser muy heterogénea y presentar una distribución muy variable de sus fracciones sólida, líquida, gaseosa y viva tanto en función de la región como de la profundidad a la que se midan.

A pesar de que las numerosas transformaciones que tienen lugar en los suelos naturales se dan de una forma lenta y progresiva, se piensa que hoy en día la actividad humana es el factor que en mayor medida condiciona su calidad y las transformaciones que ocurren en este medio (Foley et al., 2005; Garbuio et al., 2012).

En los suelos se pueden distinguir diferentes horizontes, los cuales dependen de los procesos químicos y biológicos que se den. Generalmente, son tres los horizontes más destacados en la mayoría de los suelos (A, B, y C), aunque en aquellos muy desarrollados pueden llegar a distinguirse hasta cinco horizontes diferentes (O, A, B, C y E) (Porta et al., 1994) (Figura 1-2). El horizonte O es el más superficial y está compuesto por materia orgánica (MO). Suele encontrarse en los suelos de los bosques donde el detritus suele ser muy abundante. El horizonte A es un horizonte en el que la MO está mezclada con la fracción inorgánica del suelo y es el que mayormente sustenta la agricultura. El horizonte E puede aparecer en ecosistemas forestales como resultado de una acidificación del agua tras atravesar los horizontes más someros y un lixiviado de los minerales presentes en la parte más superficial. Debajo del horizonte A (y del horizonte E si es que está presente) se encuentra el horizonte B, horizonte en el que se acumula la parte mineral. Finalmente, el horizonte C, es el más profundo y el que representa la roca madre alterada (USDA; www.nrcs.usda.gov).

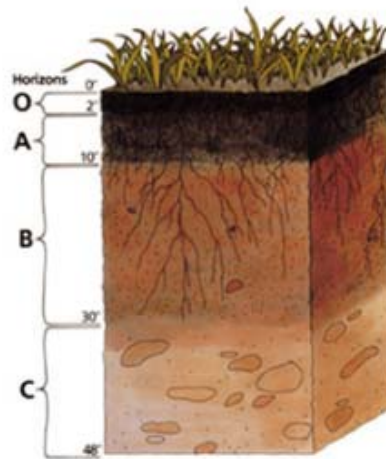


Figura 1-2. Perfil general del suelo y los principales horizontes (www.nrcs.usda.gov).

Además de sustentar la agricultura, como ya se ha mencionado, el suelo también cumple con otras funciones, siendo las siguientes las más destacadas desde un punto de vista medioambiental (Rosewell, 1999):

- (i) Regula la **actividad biológica** y los **intercambios de materia** entre las distintas fases, controlando el crecimiento de las plantas, la descomposición de la materia orgánica (MO) y el reciclado de nutrientes.
- (ii) Influye sobre la **distribución del agua** de escorrentía, infiltración y lixiviación, actuando como un inmenso almacenamiento temporal de agua que regula los flujos de agua superficiales y subterráneos.

- (iii) Actúa a modo de filtro natural, **protegiendo la calidad** del agua y el aire, reteniendo los contaminantes (nutrientes en exceso y compuestos tóxicos) y regulando su posterior degradación o solubilización.
- (iv) Representa la mayor biodiversidad del mundo, **albergando una inmensa variedad de especies** vegetales y animales a escala tanto macroscópica como microscópica.

Hay que considerar que estas funciones son el resultado de una compleja red de interacciones entre los diferentes elementos que componen el suelo. Concretamente, la MO tiene un papel de gran importancia en lo que al interés de los suelos se refiere, ya que tiene efectos beneficiosos sobre sus propiedades biológicas, químicas y físicas, lo que, a su vez, influye positivamente sobre la capacidad productiva de los mismos.

Paradójicamente, la propia agricultura es uno de los factores antropogénicos que supone la mayor amenaza para la calidad de los suelos, pues afecta de forma negativa a través de procesos como la erosión, compactación, degradación de nutrientes, salinización y la pérdida de su estructura (Pimentel et al., 1987). La concienciación acerca del efecto de la mala gestión agrícola sobre los procesos de degradación de los suelos ha traído que se desarrollen estrategias de protección, como es por ejemplo, La Estrategia Temática para la Protección del Suelo (COM/2006/231). Ésta, incluye una propuesta de Directiva para establecer un marco de protección de los suelos (COM/2006/232) con el objetivo de preservar sus funciones, prevenir su degradación y restaurar aquellos suelos que se encuentren degradados.

1.2.2. Composición del suelo

El suelo está constituido por una composición variable de sus fracciones sólida, líquida (agua u otros fluidos), gaseosa (aire) y viva (macro y microorganismos) (Figura 1-3). A su vez, la fracción sólida está compuesta por componentes inorgánicos o minerales y componentes orgánicos, siendo los primeros los más abundantes en la mayoría de los suelos (Porta et al., 1994). A continuación, se describen las características más importantes de los componentes mencionados y de mayor relevancia de acuerdo con este estudio.

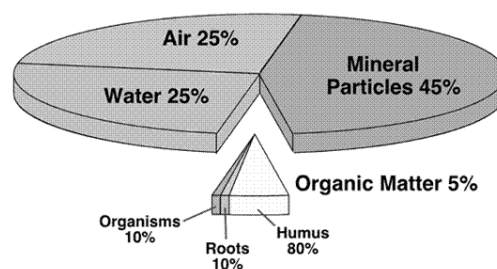


Figura 1-3. Composición media de un suelo agrícola (Reicosky, 2007).

1.2.2.1. EL AGUA EN EL SUELO

La **humedad** del suelo representa la cantidad de agua retenida en los poros de una matriz sólida y puede expresarse en términos volumétricos o gravimétricos. En hidrogeología, generalmente, se usa el contenido volumétrico de agua (θ), el cual está definido mediante la Ecuación 1-1.

$$\theta = \frac{V_w}{V_t} \quad (1-1)$$

Donde:

Θ es el contenido volumétrico de agua ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$),

V_w es el volumen de agua (cm^3),

V_t es el volumen de la muestra (cm^3).

El agua puede estar retenida en los poros de un material, ya sea suelo o roca en función de la compactación y los procesos diagenéticos. Si bien es cierto que los poros de un material representan su **porosidad total** (Ecuación 1-2), a efectos hidrológicos, los poros que representan un mayor interés, son aquellos que están interconectados, a través de los cuales puede existir un flujo de agua. Este tipo de porosidad constituye a la **porosidad eficaz** de un medio (Ecuación 1-3).

$$\Phi (\%) = \frac{V_p}{V_t} * 100 \quad (1-2)$$

$$\Phi_e (\%) = \frac{V_e}{V_t} * 100 \quad (1-3)$$

Donde:

Φ es la porosidad total ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$),

Φ_e es la porosidad eficaz ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$),

V_p es el volumen de poros (cm^3),

V_t es el volumen de la muestra (cm^3),

V_e es el volumen de poros interconectados (cm^3).

Otro concepto importante al definir la cantidad de agua de un suelo es el **grado de saturación**, el cual hace referencia a la magnitud que cuantifica la fracción de los poros que están ocupados por agua (Ecuación 1-4).

$$S(\%) = \frac{V_w}{V_e} * 100 \quad (1-4)$$

Donde:

S es el grado de saturación ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$),

V_w es el volumen de agua (cm^3),

V_e es el volumen de poros interconectados (cm^3).

Por último, el término **contenido de agua normalizado**, *relative water content*, hace referencia a la cantidad volumétrica de agua en función de las propiedades del suelo, concretamente, de los parámetros Θ_s y Θ_r (Ecuación 1-5).

$$\Theta_{rel} = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (1-5)$$

Donde:

Θ_{rel} es contenido de agua normalizado ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$),

Θ es el contenido volumétrico de agua (cm^3),

Θ_r es contenido de agua residual (cm^3),

Θ_s es contenido de agua saturado (cm^3).

Desde un punto de vista agronómico, es importante distinguir entre las diferentes formas en las que se encuentra esta agua, ya que puede presentar menor o mayor disponibilidad para la absorción por la vegetación en función de la forma en la que se encuentre. De esta manera, se distinguen el agua **higroscópica**, la que puede haber alrededor de las partículas del suelo, el agua **capilar**, la que es retenida por efectos de capilaridad y puede ser absorbida por la vegetación y el agua **gravitacional**, aquella que puede fluir libremente bajo efectos de gravedad (Figura 1-4).

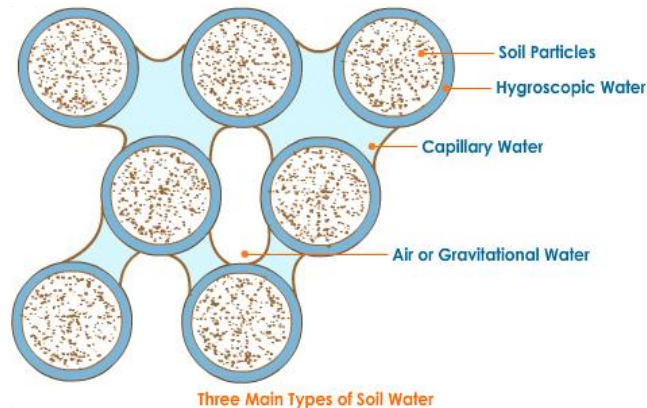


Figura 1-4. Formas de agua en el suelo (www.soils.persianguig.com).

Estos tipos de agua se distinguen en base a la energía necesaria para mover o extraer la misma de un suelo, por lo que en función de la carga de presión, o succión, al que está sometida, se definen los estados de humedad ampliamente usados como **Punto de Marchitez**, *Wilting Point* (WP), **Capacidad de Campo**, *Field Capacity* (FC) y **Saturación** (Figura 1-5).

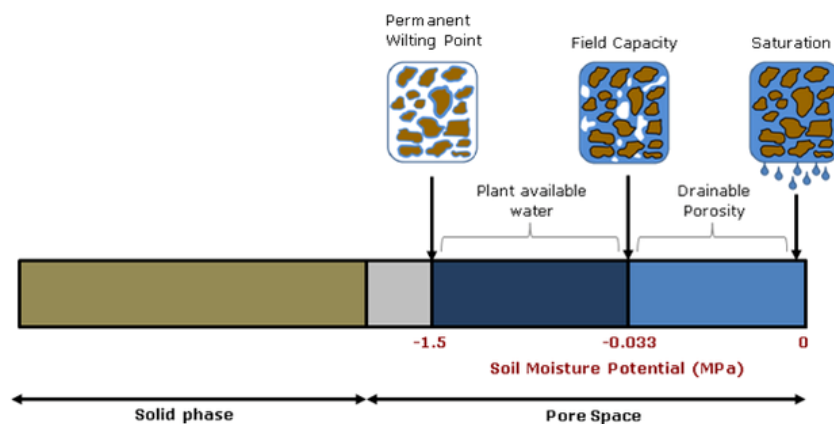


Figura 1-5. Estado de agua en el suelo (modificado de O'Geen, 2012).

Cuando un suelo está saturado o próximo a la saturación, el agua se mueve por gravedad, por lo que los flujos descendentes son los predominantes. Cuando el contenido hídrico va descendiendo, y aumentando por lo tanto la carga de presión, la succión, se alcanza el estado de capacidad de campo, el cual se consigue tras el drenaje de agua por efectos de la gravedad. En este punto, el agua es retenida por fuerzas matriciales las cuales superan la fuerza de la gravedad. Generalmente, esta agua es retenida en los microporos o mesoporos a una tensión menor de -0.033 MPa. A medida que el contenido hídrico desciende, el agua es retenida con mayor fuerza a las partículas del suelo, debido a las fuerzas de cohesión (fuerzas capilares),

llegando a un punto en el que el potencial matricial retiene el agua con una tensión tan alta que ésta deja de estar disponible para las plantas. Esta condición es conocida como el punto de marchitez y ocurre cuando la succión desciende hasta -1.5 MPa. Hay que considerar que en realidad, todos estos valores de succión varían en cierto rango en función de la textura del suelo, por lo que para una determinada condición de humedad, por ejemplo, la capacidad de campo, la succión es diferente en función a la textura (Romano y Santini, 2002). No obstante, en numerosos estudios se ha empleado esta aproximación que relaciona el estado hídrico con los valores de carga de presión o succión citados anteriormente.

El contenido hídrico entre el punto de Saturación y FC, es conocido como el **agua drenable** y no suele considerarse como agua disponible para las plantas porque su pérdida se da de una forma generalmente rápida. El contenido hídrico realmente importante para vegetación, es aquel contenido entre FC y WP, conocido como **agua Disponible**, *Available Water Content* (AWC).

Estos conceptos de humedad cambian en función de la textura de un suelo, por lo que un mismo contenido hídrico puede estar disponible para las plantas en un determinado suelo pero no en otro con características físicas diferentes. Este hecho es representado mediante la Figura 1-6, en la que se ve cómo para un mismo contenido hídrico el agua está disponible o no, en función de la textura del suelo.

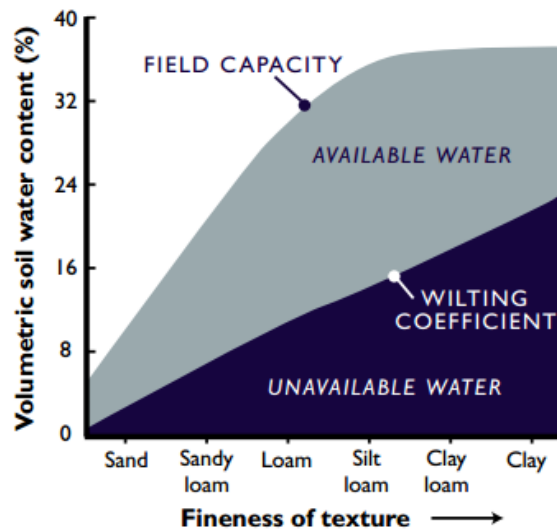


Figura 1-6. Relación entre el contenido volumétrico de agua y los estados FC y WP para diferentes clases texturales (Gurevitch et al., 2002).

1.2.2.2. FRACCIÓN MINERAL DEL SUELO

La fracción mineral del suelo suele clasificarse, por lo general, en función de su granulometría o composición, características que influyen en mayor medida sobre las propiedades físicas de los suelos, y son, por lo tanto, de gran repercusión sobre los procesos que tienen lugar en este medio. Si bien es cierto que la composición de los suelos tiene mayor importancia en estudios relacionados con la hidroquímica, la **textura** en sí puede ser

considerada como el mayor influyente sobre el movimiento del agua en los suelos. Esto se debe a la estrecha relación que existe entre ésta y las propiedades de un suelo, como son la porosidad, la densidad, la superficie específica y la conductividad hidráulica saturada (Kutilek y Nielsen, 1994).

La **densidad aparente** de un suelo seco, *bulk (dry) density*, está definida como el peso de una unidad de volumen de suelo, incluyendo su espacio poroso. Por lo tanto, la densidad aparente es indicativa del contenido total de poros y de forma general, la porosidad aumenta a medida que la textura es más fina, significando un descenso de la densidad aparente. Suele ser un dato realmente importante en el tratamiento de datos de campo, pues se emplea para transformar entre el peso y el volumen de las muestras. La **superficie específica** de un suelo es la relación entre el área superficial y la masa total de una muestra. La **conductividad hidráulica saturada** de un material (K_s) mide la capacidad del mismo para transmitir el flujo de agua cuando éste está sometido a un gradiente hidráulico. La K_s constituye el parámetro físico del suelo más determinante a la hora de cuantificar las diferentes componentes del balance global de agua (Polo et al., 2003) y su adecuada caracterización es necesaria para modelizar los procesos de infiltración y escorrentía satisfactoriamente, siendo un parámetro imprescindible en modelos hidrogeológicos (Hillel, 1998).

A pesar de ser muchos los sistemas de clasificación textural utilizados, todos ellos se basan en el contenido de partículas de distinto tamaño. Concretamente, el sistema de clasificación textural de suelos del U.S. Department of Agriculture (USDA) se considera como uno de los más utilizados en relación con la productividad agrícola y forestal (Figure 1-7) (Claver et al., 1984).

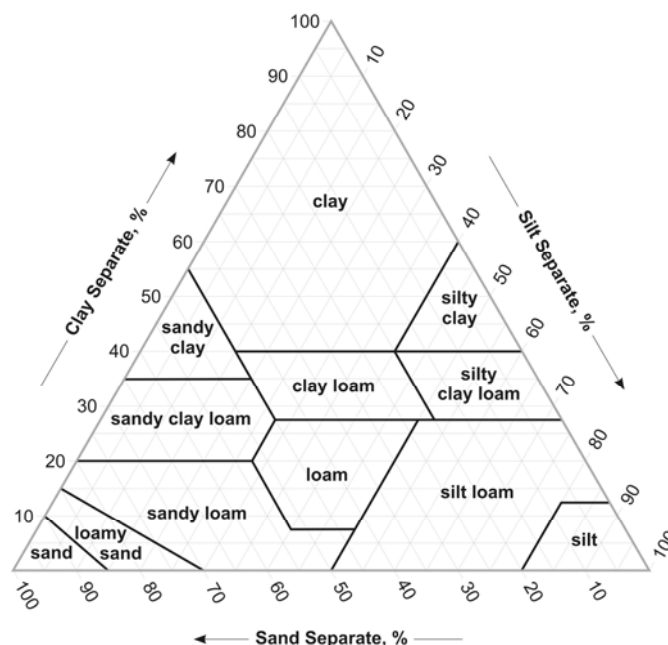


Figure 1-7. Triángulo textural (www.nrcs.usda.gov).

La estrecha relación entre la textura de los suelos y sus propiedades hidráulicas, ha contribuido al estudio y desarrollo de las **Funciones de Pedotransferencia**, *Pedotransfer*

Functions (PTF), tan ampliamente utilizadas en la actualidad (Giannouli y Antonopoulos, 2015; Ostovari et al., 2015). Estas funciones son, en realidad, relaciones entre datos medidos en campo y valores de parámetros hidráulicos que son, generalmente, más difíciles de cuantificar. Hasta la fecha, han sido propuestas diversas funciones PTF, las cuales difieren en cuanto a los datos de entrada necesarios para la conversión. Entre éstos, los más comunes son la textura, la cual puede ser expresada mediante fracciones concretas o grupos texturales, y la densidad aparente, aunque otras PTF consideran también el contenido de MO, la compactación o el contenido de gravas (Nemes et al., 2005). En la actualidad, pueden encontrarse diferentes programas informáticos con los que estimar de una manera sencilla las propiedades hidráulicas de los suelos, entre los que se encuentran: SOILPAR (Acutis y Donatelli, 2003), ROSETTA (Schaap et al., 2001) y SWC (Saxton y Rawls, 2009).

1.2.2.3. FRACCIÓN ORGÁNICA DEL SUELO

La materia orgánica (MO) del suelo es uno de los principales contribuyentes de nutrientes para las plantas y los microorganismos (Whitbread, 1995), por lo que tiene una gran repercusión sobre los flujos de nutrientes que ocurren en este medio. La cantidad y distribución de ésta, dependen de factores como el tipo de suelo, las prácticas agrícolas empleadas y las condiciones climáticas, e influyen sobre las propiedades químicas, físicas y biológicas de los suelos (Figura 1-8):

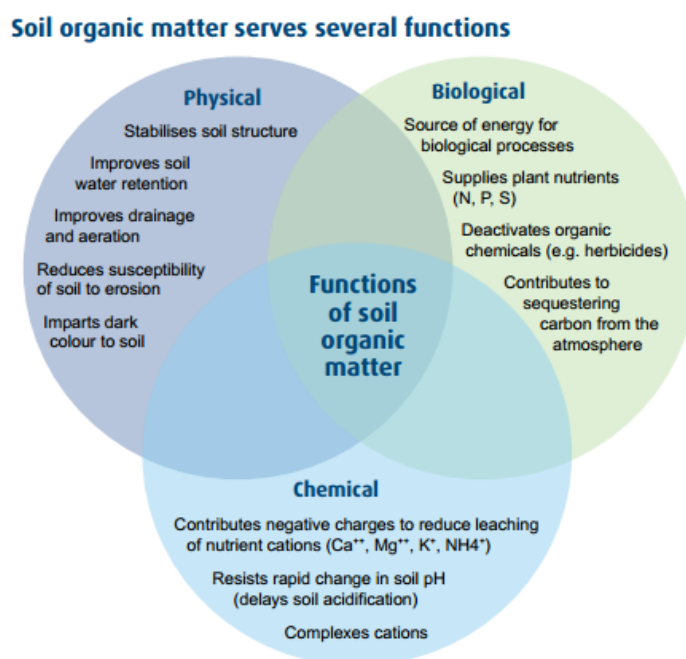


Figura 1-8. Funciones principales de la materia orgánica del suelo (www.boprc.govt.nz).

La MO es un conjunto de residuos orgánicos de origen animal y vegetal, que puede encontrarse en diferentes etapas de descomposición y que se acumula tanto en la superficie como dentro del perfil del suelo (Rosell, 1999). Incluye la materia **no humificada** (biomasa vegetal y animal senescente, y biomasa microbiana) y el **humus** (**sustancias no húmicas**, materiales orgánicos sencillos como azúcares y aminoácidos o materiales orgánicos de elevado

peso molecular como polisacáridos y proteínas, y **sustancias húmicas en sentido estricto**) (Porta et al., 1994) (Figura 1-9).

El término humus suele emplearse en sentido amplio para indicar aquellas sustancias orgánicas que son producto de los procesos de humificación (descomposición, degradación y síntesis). Este término abarca dos tipos de compuestos. Por un lado, las **sustancias no húmicas**; son aquellas que incluyen materiales orgánicos cuyas características químicas resultan todavía identificables (como son por ejemplo, glúcidos, proteínas, aminoácidos, grasas y ácidos orgánicos de bajo peso molecular (Schnitzer y Khan, 1978), y son en su mayoría fácilmente biodegradables, mostrando una corta vida en los suelos). Por otro, las **sustancias húmicas**; material al que se conoce como humus en sentido estricto (caracterizado por no presentar características físicas y químicas específicas (Porta et al., 1994), proceder de la degradación química y biológica de residuos de plantas y animales llevadas a cabo por microorganismos del suelo). Las transformaciones sufridas por estas sustancias hacen que los compuestos orgánicos resultantes sean más estables que los iniciales en el medio físico al que han ido a parar (Porta et al., 1994).

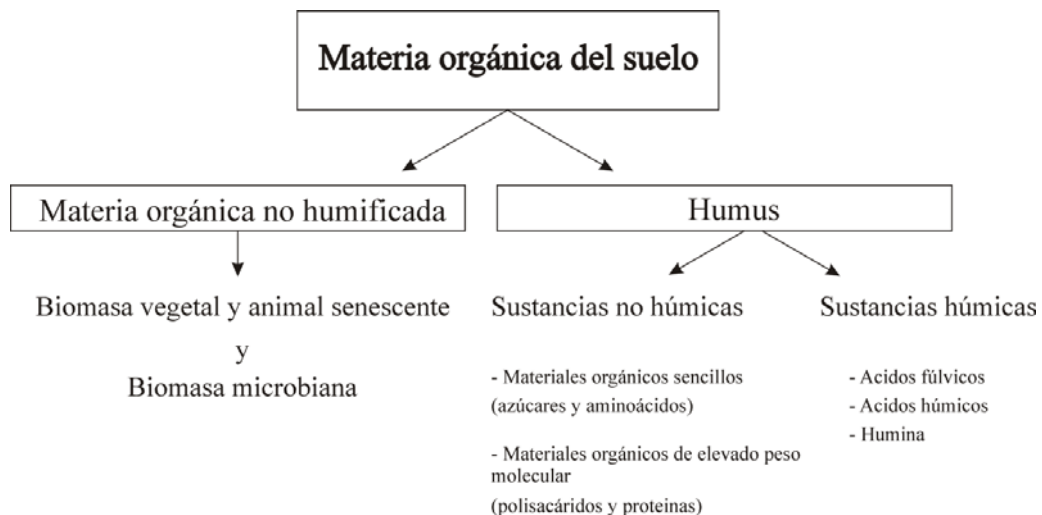


Figura 1-9. Composición de la materia orgánica del suelo (basado en Porta et al., 1994).

Las sustancias húmicas, además, se pueden dividir en tres fracciones diferentes: ácidos húmicos, ácidos fúlvicos y humina, y representan, por lo menos, el 50% de la materia orgánica presente en los suelos (Hayes et al., 1989; Simpson et al., 2007). Porta et al., (1994) presentaron un modelo conceptual de los procesos que pueden sufrir los materiales orgánicos desde que son incorporados al suelo hasta que salen de este medio, considerando las posibles transformaciones que pueden tener lugar, el cual se presenta en la Figura 1-10.

En cualquier caso, es importante destacar que el proceso de humificación (conjunto de reacciones químicas, procesos biológicos y de síntesis microbiana), implica cambios en la complejidad química de la materia orgánica, aumentando su resistencia a la biodegradación (Tate, 1987).

La población bacteriana que lleva a cabo todos estos procesos puede ser clasificada en función al tipo de respiración y alimentación. Así, mientras que las bacterias **autótrofas** obtienen la energía necesaria de la oxidación de sustancias inorgánicas como el amonio, y

compuestos de azufre y hierro, y utilizan una fuente inorgánica de carbono, el CO₂, las bacterias **heterótrofas**, por el contrario, obtienen de la MO tanto la energía como el carbono y son las más abundantes en los suelos (Saether y Caritat, 1997). En cuanto a la clasificación de las bacterias por el tipo de respiración se refiere, existe una población que juega un papel importante desde el punto de vista de la contaminación agrícola. Es la población anaeróbica y, especialmente, la **anaeróbica facultativa**, la cual en situaciones en las que hay suficiente nitrato, emplean éste como aceptor de electrones, siendo este reducido mediante el proceso de desnitrificación (Saether y Caritat, 1997). De cualquier modo, tanto los microorganismos aerobios como anerobios, son fundamentales para la descomposición de la materia orgánica (Schachtschabel et al., 1989), llegando a considerarse como los mayores responsables de la degradación y transformación de la misma (Killham y Foster, 1994).

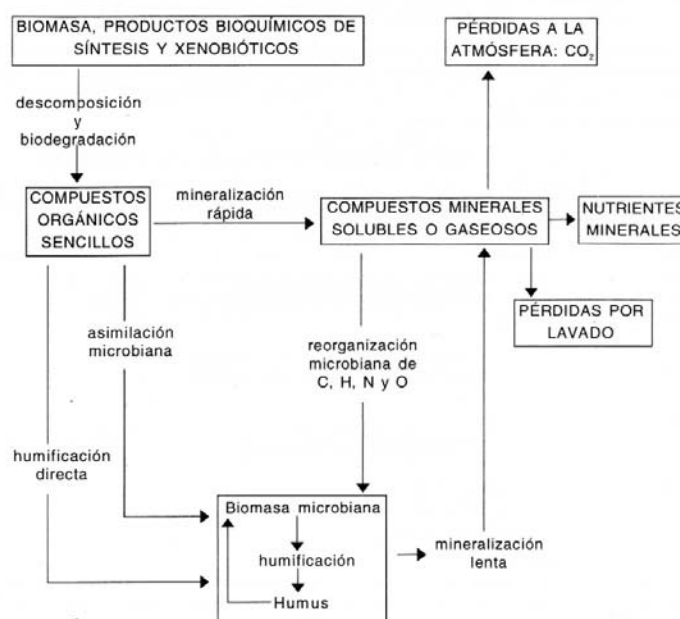


Figura 1-10. Principales procesos de la materia orgánica (Porta et al., 1994).

El carbono orgánico (CO) es el principal compuesto de la MO del suelo, estando cuantificado, con excepción de los suelos calcáreos, en torno al 60% de la MO. De hecho, los métodos analíticos determinan el contenido de CO del suelo y es este valor el que convierten posteriormente mediante factores empíricos como el de *van Benmelen* (Ecuación 1-6) para estimar la cantidad de la MO del medio (Jackson, 1964). Otros compuestos orgánicos que constituyen la MO son el oxígeno, hidrógeno, nitrógeno, fósforo, azufre y otros elementos menos comunes.

$$MO = CO * 1.724 \tag{1-6}$$

Cuando se determina el CO de una muestra, es importante considerar cuan representativo es el valor de carbono orgánico total respecto a las diferentes fracciones de carbono divididas en función de la reactividad o estabilidad biológica (van Veen et al., 1984). Realmente, para la evaluación de los cambios de MO asociados a sistemas de labranza, uso y capacidad productiva de los suelos, es más precisa la relación entre C orgánico lábil y C orgánico total que la cantidad de CO medida. En efecto, numerosos estudios han observado que

el manejo del suelo (rotación de cultivos, labranza y fertilización) tiene mayor repercusión sobre la distribución del reservorio de C orgánico lábil que sobre la cantidad de C total (Janzen, 1987; Dalal y Mayer, 1987; Christensen, 1988).

El hecho de necesitar clasificar el contenido de nutrientes en diferentes grupos que se distingan no sólo en cuanto a su composición sino que también en la velocidad de reacción o la bio-disponibilidad, lo que está estrechamente relacionado a los propósitos de modelización, da lugar a la división de reservorios conceptuales. Éstos pueden contemplar desde la materia orgánica lábil derivada del residuo vegetal, hasta el carbono altamente resistente que proviene de la materia orgánica humificada o materia orgánica inerte (Skjemstad et al., 1998).

A pesar de que se ha intentado establecer un criterio físico o químico para la división de los reservorios, ha sido una tarea muy difícil y por ello la división se ha basado en la cinética de las reacciones, dando lugar a reservorios conceptuales más que reservorios basados en propiedades reales de los suelos (Cambardella y Elliott, 1992).

No obstante, el hecho de que los nutrientes inorgánicos predominen sobre los orgánicos en diferentes ecosistemas, sobre todo en aquellos que son objeto de estudio, habitualmente relacionados con contaminación antrópica, ha sido una de las principales razones por las que se haya prestado poca atención a la bio-disponibilidad de los nutrientes orgánicos en evaluaciones de contaminación (Hendrickson et al., 2002). Y es por ello, que la caracterización de estos reservorios esté poco discutida en la bibliografía. Aún así, no hay que olvidar que la bio-disponibilidad de los diferentes constituyentes de la MO influye en el uso de ese sustrato orgánico por los microorganismos, generalmente heterótrofos (DeBusk et al., 2001), y por lo tanto, es de gran importancia a la hora de estudiar la dinámica de los procesos que tienen lugar en el suelo.

De forma general, en las últimas décadas se ha adoptado una hipótesis relacionada con la bio-disponibilidad del carbono y otros nutrientes, la cual divide estos compuestos en dos reservorios diferentes; (i) el reservorio refractario o estable, reservorio que considera los compuestos que pueden ser transformados en un periodo de miles de años (Campbell et al., 1967) y (ii) el reservorio lábil, reservorio que considera los compuestos que son transformados en menos de varias décadas (Hsieh, 1992). Quedando generalmente asumido que la MO reciente y no descompuesta es más fácilmente biodegradable que la que ha sufrido una fuerte alteración diagenética a través de diversos ciclos de descomposición. Así, se piensa que las sustancias no húmicas (carbohidratos, proteínas, lípidos y ácidos nucleídos) están más bio-disponibles para los microorganismos y que las sustancias húmicas pueden llegar a considerarse como inertes (Wetzel, 1983).

La MO también puede ser clasificada en función del tamaño de las partículas, dando lugar a la materia orgánica particulada, MOP, (o en referencia al carbono, el carbono orgánico particulado, *Particulate Organic Carbon*, POC) y a la materia orgánica disuelta, MOD (o en referencia al carbono, carbono orgánico disuelto, *Dissolved Organic Carbon*, DOC), refiriéndose mediante este último término a la materia orgánica que tiene un tamaño menor a 0.45 μm (Thurman, 1985).

A pesar de que, aparentemente, la MOD sea la que mayor bio-disponibilidad tenga para los microorganismos, hay que tener en cuenta, que ésta puede presentar un tamaño de grano tan fino debido a los fuertes procesos de degradación sufridos y, por lo tanto, ser la fracción más refractaria (Hedges et al., 1994). Conociendo estas diferencias en la bio-disponibilidad se demuestra la necesidad de considerar las fracciones de MO lábil y refractaria tanto de la parte particulada (Hendrickson et al., 2002) como de la disuelta (Ogura, 1975), a pesar de que no sea una tarea sencilla y hagan falta complejos análisis de determinación.

Distribución de la materia orgánica en el suelo

La distribución de la MO varía en gran medida tanto horizontalmente a través del paisaje como verticalmente en profundidad dentro del perfil de los suelos (Jonshon et al., 1995). Esta distribución depende de la interacción entre los procesos que participan en la creación del suelo (Jenny, 1941) ya que éstos repercuten sobre la forma en la que la MO es incorporada a los suelos, el tipo de planta, animal y microorganismos que haya dentro de un ecosistema dado, y la actividad biológica de los mismos (Tate, 1987).

La deposición de hojarasca, entrada de residuos vegetales y su permanencia en la superficie del suelo, trae consigo una acumulación de POC, especialmente en las capas más superficiales, que promueven una estratificación del C a lo largo del perfil del suelo (Franzluebbers, 2002; Lal, 2009). Concretamente, en las parcelas agrícolas se estima que el 50% del POC esté localizado en los primeros 60 cm (Jobbagy et al., 2000) (Figura 1-11).

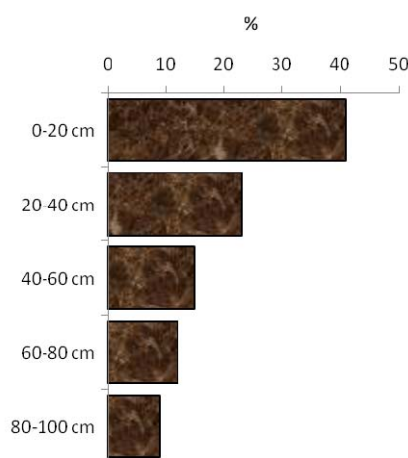


Figura 1-11. Distribución media del carbono orgánico particulado en zonas agrícolas (basado en Jobbagy, 2000).

Hay que considerar, además, que la actividad antropogénica ha traído grandes cambios tanto en los niveles de C como de N en los suelos a través de las prácticas agrícolas (cultivo, fertilización, deforestación, cambios de usos del suelo, urbanización...) obteniendo una considerable variación temporal de POC en estos suelos (Johnson, 1995).

En cuanto al carbono orgánico disuelto (DOC) se refiere, éste es generado en los horizontes orgánicos del suelo por metabolismo microbiano, exudados radiculares y lavado de la materia orgánica (Schiff et al., 1997), y transportado a la zona saturada por recarga (Thurman, 1985) o a masas de agua superficiales por escorrentía (Jordan et al., 1997). A pesar de que su

concentración en las aguas subterráneas muestra una gran variabilidad espacial, se mantiene generalmente estable con el paso del tiempo (Pabich et al., 2001). Los cambios de concentración del DOC reflejan los procesos biogeoquímicos que determinan la composición de las aguas subterráneas, y esta variabilidad depende de factores como la distribución de la aportación de materia orgánica en superficie y de la profundidad del nivel freático (Pabich et al., 2001). El espesor de la zona no saturada, influye en la concentración de DOC del acuífero, ya que cuanto mayor es este espesor, los procesos de sorción, complejación a superficies minerales y minerales de arcilla (Thurman 1985), oxidación microbiana o CO_2 (Chapelle, 1992), precipitación, floculación y formación de complejos no solubles (Kookana and Naidu, 1998) pueden ocurrir en un mayor transcurso, disminuyendo así, la concentración de DOC del agua que recarga el acuífero. En la zona saturada, la concentración generalmente disminuye con la profundidad atribuido a la asorción abiótica y oxidación microbiana (Pabich et al., 2001).

1.2.3. Transformación de nutrientes en el suelo

Las plantas necesitan macro y micronutrientes para su crecimiento y desarrollo. Los macronutrientes son aquellos que requieren en mayor cantidad e incluyen el carbono y nutrientes minerales como el nitrógeno, fósforo y potasio (Freeman, 2008). Precisamente, la disponibilidad de nitrógeno en el suelo es el resultado de complejas transformaciones químicas y biológicas, las cuales se dan mayormente por los microorganismos del suelo, formando el ciclo del nitrógeno. En efecto, la microfauna del suelo está considerada como la más influyente en lo que a las transformaciones bioquímicas del suelo se refiere (Lupwayi et al., 2001) y se estima que el 80-90% de las reacciones que ocurren en el suelo, es debida a su actividad (Naninipieri et al., 2003).

Si bien es cierto que no todos los códigos enfocados a la simulación de la contaminación por nitratos modelizan las transformaciones entre los distintos reservorios de N de la misma manera, es necesario conocer los principales factores que condicionan dichas transformaciones. A continuación, se describen los principales procesos de transformación que afectan al nitrógeno y al carbono, pues se cree necesario para la comprensión de su conceptualización en los códigos empleados en este estudio.

1.2.3.1. CICLO DEL NITRÓGENO

El nitrógeno (N) es un elemento fundamental para el metabolismo y crecimiento de todos los organismos. En ecosistemas agrícolas, condiciona la evolución y producción de los cultivos, estando la disponibilidad de este elemento completamente relacionada a una serie de procesos físicos y transformaciones químicas y biológicas que comprenden su ciclo (Figura 1-12).

En sistemas agrícolas, la **deposición atmosférica** y la **fijación biológica** de N constituyen las principales entradas de nitrógeno después de la **fertilización**. Las emisiones industriales así como la combustión de hidrocarburos, carbón o desechos agrícolas liberan a la atmósfera una serie de compuestos que son posteriormente depositados tanto por vía seca como por vía húmeda en forma de óxidos de nitrógeno (NO_x) y amoníaco (NH_3) (Peters et al., 2002). Por otro lado, algunas especies de bacterias y algas son capaces de llevar a cabo la fijación de

nitrógeno atmosférico (N₂) en el suelo mediante la reducción de N₂ a NH₃ (Hayness et al., 1993). Desde el punto de vista agrícola, las más importantes son las bacterias del género *Rhizobia*, las cuales, mediante relaciones simbióticas con las leguminosas, llegan a fijar grandes cantidades de nitrógeno aumentando el N orgánico del suelo tras su cosecha.

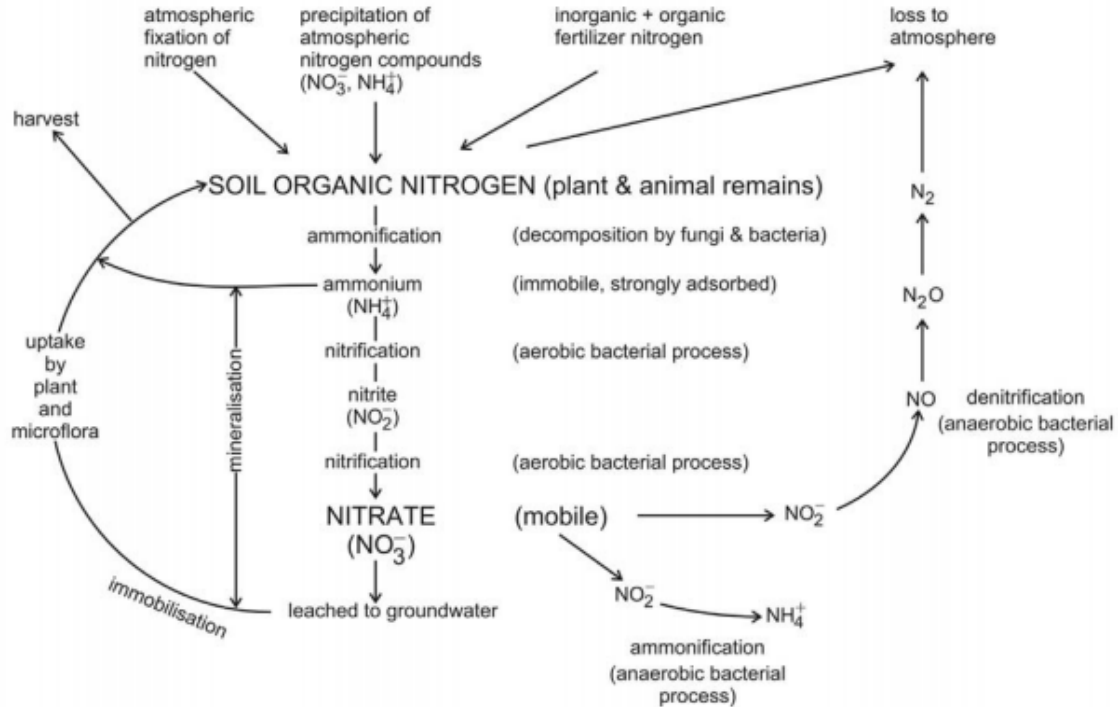
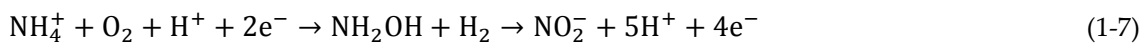


Figura 1-12. Representación del ciclo del Nitrógeno (Hiscock et al., 1991).

El nitrógeno puede sufrir diferentes transformaciones llevadas a cabo por los microorganismos del suelo. Cuando el N orgánico es incorporado al sistema, es colonizado por una gran variedad de bacterias heterótrofas, las cuales, para obtener la energía necesaria, oxidan estos compuestos orgánicos a CO₂. Durante este proceso de descomposición, abundantes nutrientes elementales son transformados de su forma orgánica a inorgánica, mediante un proceso conocido como **mineralización**. La mineralización del nitrógeno orgánico implica la degradación de proteínas, aminoácidos, ácidos nucleídos y otros compuestos nitrogenados a NH₄⁺ y NH₃ (Canter, 1997), un proceso de gran importancia pues los compuestos orgánicos están prácticamente inaccesibles para la vegetación (Battle-Aguilar et al., 2011). La mineralización se da en dos pasos distinguidos (Schinner et al., 1995). Primero, a través de la **amonificación** el N orgánico es convertido a amonio y, posteriormente, si hay oxígeno suficiente, las bacterias autótrofas del suelo realizan el proceso de **nitrificación** por el cual oxidan el amonio a nitrato para obtener la energía necesaria (U.S. Environmental Protection Agency, 1994). La transformación se da en dos fases bien diferenciadas y asociadas a diferentes grupos bacterianos. Primero, las bacterias del género *Nitrosomonas* oxidan el amonio a nitrito (Ecuación 1-7) y después, las bacterias del género *Nitrobacter* oxidan el amonio a nitrito (Ecuación 1-8).



Dado que la oxidación del nitrito (NO_2^-) es un proceso más rápido que la del amonio (NH_4^+), el contenido en nitrito de los suelos suele ser muy bajo (Powlson, 1993). Este proceso se facilita en suelos bien drenados, con temperaturas superiores a 10°C y en pH neutros, mientras que es inhibido en suelos anóxicos (Madigan et al., 2006). Además, el NH_4^+ puede ser inmovilizado por adsorción a la superficie de las partículas de arcilla y la MO (Johnson et al., 1995), que tienen una carga negativa.

Cuando el N del sustrato no es suficiente para el crecimiento de las bacterias, éstas utilizan NH_4^+ y NO_3^- de la solución del suelo para su propio crecimiento (Neitsch et al., 2009), en un proceso conocido como **inmovilización**. Este proceso, está definido como la transformación del nitrógeno inorgánico (NH_4^+ , NO_3^- y NO_2^-) en nitrógeno orgánico (Jansson y Persson, 1982) y ocurre cuando la cantidad de carbono orgánico en el sistema no es limitante (Campuzano, 2014). Dado que la mineralización y la inmovilización actúan en sentidos contrarios y se dan simultáneamente en el suelo (Brady y Weil, 2002), su balance es conocido como **mineralización neta**. Así, este proceso no sólo depende del contenido de MO y su ratio de C:N que establece la dirección de este proceso y determina, por lo tanto, si la reacción se da en un sentido o en otro, sino que también de la humedad y la temperatura del suelo. Cuanto mayor es la temperatura y menor la humedad, mayor es la fracción de nitrógeno mineralizado.

En los que se refiere a los procesos que contribuyen a la salida del N de un sistema agrícola, la **absorción** por la vegetación suele representar la vía de salida más importante. Su cuantía es variable en función de diversos factores, siendo uno de ellos, la propia vegetación. Así, en función del tipo de cultivo, la absorción puede representar un 10-70% del N aplicado (Isherwood, 2000), aunque también varía en función de las prácticas agrícolas y la propia climatología.

La **desnitrificación** es el proceso por el cual el nitrato sufre un complejo proceso de reducción hasta dar con nitrógeno molecular (N_2) (Averill y Tiedje, 1982). Es un proceso anaeróbico, por lo que sólo se da en suelos poco drenados próximos a la saturación y con la existencia de materia orgánica degradable, la cual genera una demanda de oxígeno (Martinez, 2008) que es satisfecha por el oxígeno que compone el ión nitrato. Diferentes bacterias heterótrofas son capaces de realizar este proceso, en el que como se ha mencionado, requieren una fuente de carbono orgánico (Ecuación 1-9).



Generalmente, las bacterias responsables de este proceso son bacterias anaerobias facultativas, lo que significa que normalmente emplean oxígeno para respirar, y es en condiciones anaerobias cuando emplean el ión nitrato (NO_3^-) como aceptor de electrones producidos durante la descomposición de la materia orgánica. Además de las condiciones anóxicas, para que se de este proceso es necesario un alto contenido de nitrato, una fuente de carbono fácilmente asimilable, temperatura de suelo moderada y presencia de microorganismos denitrificantes (Averill y Tiedje, 1982).

De todas las formas de N inorgánico presente en el medio, el NO_3^- es generalmente la más abundante en suelos bien drenados y oxigenados. Gran parte de este nitrato es resultado de la nitrificación del NH_4^+ , el cual a su vez puede proceder de la mineralización del nitrógeno

orgánico del suelo, de los fertilizantes amoniacales aplicados o incluso de la deposición atmosférica (Muñoz, 2012).

Cuando los cultivos están en la fase de máximo desarrollo, la absorción de NO_3^- es muy alta, y por lo tanto, su susceptibilidad a ser **lixiviado**, es baja. Sin embargo, cuando las plantas no requieren tanto nitrato y la absorción es menor, este compuesto puede lixiviarse más fácilmente hacia las capas más profundas del suelo, llegando posteriormente a recargar los acuíferos. El nitrato es, una forma de N muy soluble, por lo que a través de la disolución del suelo, se pierde fácilmente de los sistemas agrícolas, suponiendo unos de los problemas asociados a la agricultura.

Según Richards et al., (1999), los momentos más susceptibles a la lixiviación de nitratos en los sistemas agrícolas son los siguientes:

- (i) Periodos lluviosos en los que los carecen de cualquier tipo de cubierta vegetal.
- (ii) Ausencia de periodos de barbecho, estimulando la mineralización de nitrógeno e incrementando la cantidad de nitrato susceptible de ser lixiviado.
- (iii) Repetida y excesiva aplicación de fertilizantes nitrogenados

La **erosión** contribuye a la pérdida de nitrógeno orgánico particulado, aún así, debido a su interacción con las arcillas del suelo y su rápida mineralización, no repercute tanto como la lixiviación del nitrato en lo que a la calidad de las aguas se refiere (Chen et al., 2005).

Otra de las salidas que puede llegar a ser de gran importancia, es la **volatilización**, la cual en función de las prácticas agrícolas, puede llegar a suponer la pérdida del 50% del fertilizante amoniacal aplicado (Sommer et al., 2004). Mediante este proceso, el amonio adsorbido deja de estar en equilibrio y es reducido para dar amoniaco en forma gaseosa que es rápidamente liberado a la atmósfera. Esta pérdida, suele darse en suelos alcalinos en los que se aplican fertilizantes ricos en urea (Ecuación 1-10).



1.2.3.2. CICLO DEL CARBONO

El ciclo del carbono (C) considera el movimiento de este elemento entre los diferentes reservorios del planeta (geósfera, biósfera y atmósfera). De forma general, podría decirse que el carbono de los seres vivos y sus derivados es devuelto a la atmósfera a través de diferentes procesos que ocurren a diferente escala temporal. Anualmente, se mueven grandes cantidades de carbono entre estos reservorios (Post et al., 1990) y en sistemas naturales, el intercambio entre la atmósfera y biósfera está en equilibrio.

Los principales procesos de intercambio de C entre el suelo y la atmósfera son la fotosíntesis y la respiración. La vegetación fija el carbono dióxido (CO_2) atmosférico a través del proceso de **fotosíntesis**, siendo este proceso la principal fuente del carbono orgánico de los suelos (Battlle-Aguilar, 2011) (Figura 1-13). Durante la fotosíntesis el CO_2 es usado como fuente de carbono para el propio crecimiento de la vegetación, siendo creadas moléculas orgánicas complejas y usando la energía solar como fuente de energía (Killham y Foster, 1994) (Ecuación 1-11).



Además, cuando los residuos vegetales son incorporados al suelo (tras la muerte de la vegetación o su incorporación tras la cosecha), éstos sufren complejos procesos de **degradación** por los microorganismos del suelo. Mediante la **descomposición**, proceso por el que el residuo es convertido a compuestos orgánicos simples, y la **mineralización**, proceso por el que se forman compuestos carbonatados (Neitsch et al., 2009), los compuestos más complejos se van degradando. Otra parte del carbono es usada por los microorganismos como fuente de energía, y es liberada a la atmósfera en forma de CO_2 a través del proceso de **respiración** (Johnson et al., 1995) (Ecuación 1-12).



Tanto los compuestos orgánicos como los inorgánicos son susceptibles de **pérdidas por erosión** (Figura 1-13).

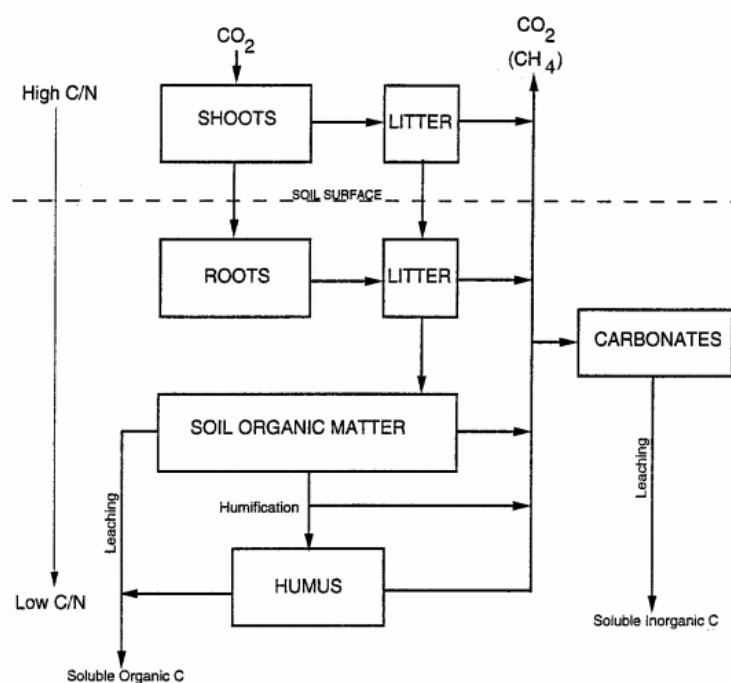


Figura 1-13. Representación del ciclo del Carbono (Johnson, 1995).

1.3. MODELIZACIÓN DE ECOSISTEMAS AGRÍCOLAS

1.3.1. Conceptos generales

1.3.1.1. TERMINOLOGÍA

El término **modelo** conlleva diferentes definiciones en función del contexto en el que se considere (Konikow y Bredehoeft, 1992). En estudios científicos, puede considerarse que un modelo es una simplificación de la realidad, es decir, una representación aproximada de un proceso o situación de campo (Anderson y Woessner, 1992).

Debido a la complejidad de los sistemas naturales, los modelos no son capaces de considerar todos los procesos que tienen lugar en un sistema real y tienen que considerarse una serie de simplificaciones e hipótesis, preservando las características esenciales del objetivo con el que se ha desarrollado el estudio (Andreu, 1993). Llegados a este punto, conviene destacar que debido a la falta de rigurosidad a la hora de emplear la correcta terminología en la modelización, quedan varios términos cuyo significado ha sido empleado indistintamente en la literatura causando confusión. Concretamente, el término modelo es uno de ellos, siendo en muchos estudios empleado para hacer referencia a un **código numérico**. Conviene destacar, así, que el código es la formulación matemática en forma de software, y modelo, es el sistema construido mediante un código específico y un conjunto de parámetros y variables determinadas (Anderson y Woessner, 1992). Del mismo modo, el término modelo conceptual es indistintamente empleado para referirse al funcionamiento teórico planteado de un sistema y también para referirse al tipo de modelo el cual describe los procesos reales mediante ecuaciones empíricas (Refsgaard, 2007).

Los **parámetros** del modelo son valores que caracterizan el sistema y son asumidos constantes, como, por ejemplo, la conductividad hidráulica saturada o la rugosidad de un suelo. En base a los conocimientos del medio estudiado, en cada caso debe establecerse un rango de valores para los parámetros considerados por cada código, pues durante la etapa de calibración (también conocida como modelización inversa), se procederá al ajuste de los mismos buscando una simulación satisfactoria de ciertas variables.

Las **variables** son valores que describen cuantitativamente los fenómenos naturales, pudiendo variar tanto temporal como espacialmente. Así, se distinguen tres tipos de variables: (i) las **variables de entrada**, series de datos independientes a las que se les aplica una serie de ecuaciones para intentar representar otra variable (precipitación, temperatura, radiación solar...); (ii) las **variables de salida**, series de datos que representan la salida de agua o nutrientes del sistema, calculadas en base a las ecuaciones que definen los procesos (evapotranspiración, escorrentía en el punto de salida, cantidad de nutrientes que sale del sistema mediante la cosecha de los cultivos...); y, (iii) las **variables de estado**, series de datos que representan una situación del modelo que afecta a otras variables de estado y de salida (humedad del suelo, posición del nivel freático, concentración de nutrientes...).

De forma general, los modelos hidrológicos son herramientas numéricas que permiten simular uno o más procesos hidrológicos que tienen lugar en una cuenca hidrológica y pueden estar acoplados a modelos hidrogeológicos o de calidad. Con el avance de la tecnología computacional, especialmente la llevada a cabo durante las últimas décadas, los modelos matemáticos han sido ampliamente desarrollados. Además, la mayor disponibilidad de observaciones hidrológicas distribuidas y un mejor conocimiento de la física y dinámica de los sistemas hidrológicos, ha permitido que los modelos hidrológicos actuales sean capaces de contemplar sistemas de una mayor complejidad (Liu y Gupta, 2007), convirtiéndose de esta forma, en útiles herramientas de gestión. Según Fernández et al. (1997) los principales objetivos de los modelos son:

- Conocer el comportamiento del sistema ante una serie de acciones
- Predecir situaciones futuras

- Optimizar la gestión del sistema
- Mejorar el conocimiento de los sistemas naturales
- Estudiar situaciones especiales

1.3.1.2. CLASIFICACIÓN

Desde la aparición de los primeros códigos hidrológicos y de calidad de las aguas, los modelos construidos han sido clasificados en base a diferentes características (Chow et al., 1988). A continuación, se describen brevemente los términos más empleados a la hora de clasificar estos modelos (Figura 1-14).

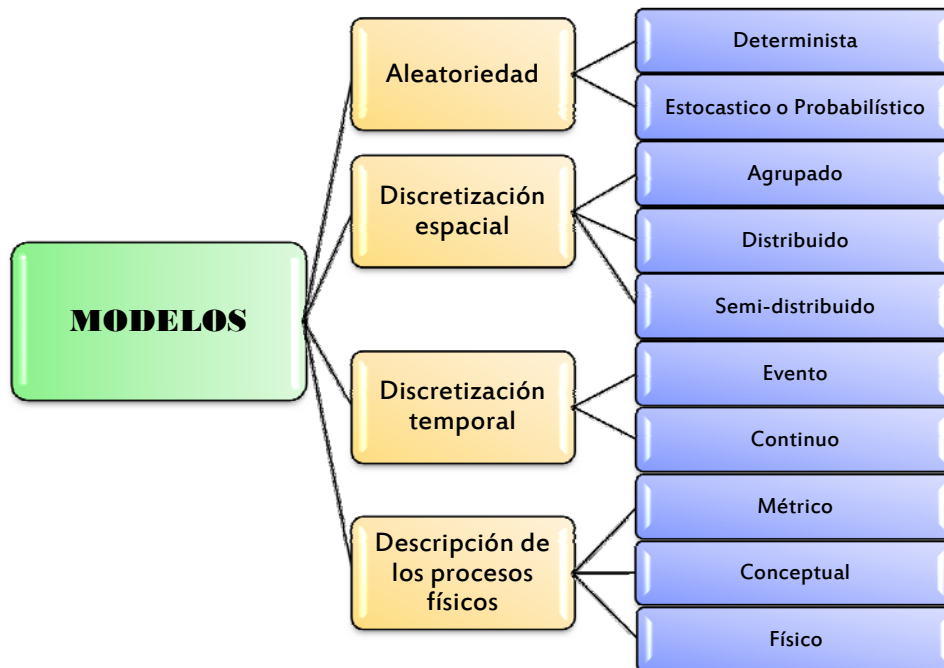


Figura 1-14. Clasificación de los modelos matemáticos.

La **aleatoriedad** es una característica de los modelos mediante la cual se describe si el modelo consiste en generar una cuantificación de la fiabilidad de un pronóstico (modelos estocásticos) o por el contrario, el modelo genera un conjunto de salida para el conjunto de parámetros y variables de entrada considerados (modelos deterministas). La **discretización espacial** distingue a los modelos en tres clases diferentes. Los modelos agrupados, consideran las cuencas hidrográficas como un conjunto homogéneo; los semi-distribuidos, calculan la contribución de cada subcuenca, que a su vez, es tratada como un conjunto homogéneo; y los distribuidos, dividen la cuenca en unidades elementales, existiendo una continuidad entre los nodos que componen el sistema (Singh, 1988). La **discretización temporal** de un modelo es la que distingue entre modelos continuos o modelos de único evento. Por último, los modelos pueden ser clasificados en función a su **representación de los procesos físicos**. De esta forma, se distinguen: los modelos métricos, los cuales son relaciones estadísticas que relacionan un conjunto de entrada con un conjunto de salida; los modelos conceptuales, que ya sean agrupados o semi-distribuidos consideran la cuenca como un sistema de reservorios conceptuales transformando los procesos reales en ecuaciones estadísticamente significativas

(empíricas); y los modelos físicos, los cuales se basan en las leyes físicas que gobiernan los procesos (conservación de la masa, del momento y de la energía). En este punto, conviene destacar el término **physically-based** tan popularizado en los últimos años y que tiene una gran controversia debido a su confuso significado, ya que sugiriendo una connotación de robustez, ha sido vinculado tanto a modelos físicos como a conceptuales.

Por lo general, los modelos agrupados suelen requerir menor cantidad de datos y suelen ser más sencillos de utilizar. Aún así, su rango de aplicación es limitado y si los valores medios de los parámetros no son representativos a nivel de cuenca, pueden no servir para estudios específicos. Por el contrario, los modelos distribuidos tienen un mayor rango de aplicación, pero requieren un mayor número de datos y suelen ser más complicados de aplicar. La habilidad de los modelos distribuidos para representar la heterogeneidad a nivel de cuenca, hace que sean considerados como importantes y útiles herramientas de gestión con las que estudiar el impacto de factores espacialmente distribuidos, como son el uso de suelo y los parámetros del suelo sobre los procesos hidrológicos (Beven, 1989; Fohrer et al., 2002).

De la combinación de las características citadas, aparecen fundamentalmente los tres tipos de modelos más utilizados (Refsgaard, 1996):

- Modelos métricos (**caja negra**)
- Modelos agrupados conceptuales (**caja gris**)
- Modelos físicos distribuidos (**caja blanca**)

En el caso de los modelos físicos, concretamente, existen diferentes métodos numéricos con los que resolver de las ecuaciones diferenciales resultantes de la modelización hidrogeológica (Samper, 2013). De esta forma, los modelos físicos pueden ser clasificados en modelos **analíticos**, **analógicos** y **numéricos**. Los **modelos analíticos**, son aquellos que dan una solución exacta de la ecuación diferencial, siendo sólo aplicables en casos particulares, generalmente muy simples. Los **modelos analógicos**, son aquellos modelos que resuelven las ecuaciones diferenciales de un modo indirecto, empleando fenómenos físicos que satisfacen la misma ecuación que la que rige el fenómeno estudiado. Por último, los **modelos numéricos**, son aquellos que renuncian a conocer la solución exacta y obtienen una solución aproximada en una serie de puntos obtenidos de la discretización temporal y espacial. Así, estos modelos convierten las ecuaciones diferenciales en un conjunto de ecuaciones algebraicas que permiten resolver situaciones muy diversas, por lo que es el tipo de modelo más empleado en la actualidad (Samper, 2013). Dada la orientación de esta tesis, no se entra en detalle al funcionamiento de estos métodos numéricos ni a las alternativas mediante las que se hace frente a la resolución numérica de ecuaciones (e.g. métodos de **diferencias finitas** y **elementos finitos**) ni a los problemas relacionados con su resolución (**consistencia**, **estabilidad**, **convergencia**...).

1.3.1.3. PROTOCOLO DE MODELIZACIÓN

Una vez identificada la necesidad de emplear un modelo numérico, así como el principal objetivo de la investigación, suele seguirse un protocolo generalizado, el cual incluye las fases mostradas en la Figura 1-15.

Tras definir el objetivo de la modelización, se establece un modelo conceptual (un modelo de funcionamiento basado en datos de campo). Así, es posible escoger el código numérico que mejor represente el problema de estudio y se procede a la construcción del modelo mediante la definición de los parámetros y variables.

El obtener buenos resultados de los modelos, especialmente de modelos hidrológicos físicos, suele ser una etapa muy costosa, ya que suele ser común no conseguir un buen ajuste de las variables a pesar de dar a los parámetros del modelo valores observados en campo. Cuando esto ocurre, suele tenderse a la **calibración** de los parámetros del modelo, mediante la cual se busca su óptimo valor con el objetivo de ajustar las variables del modelo a los datos observados.

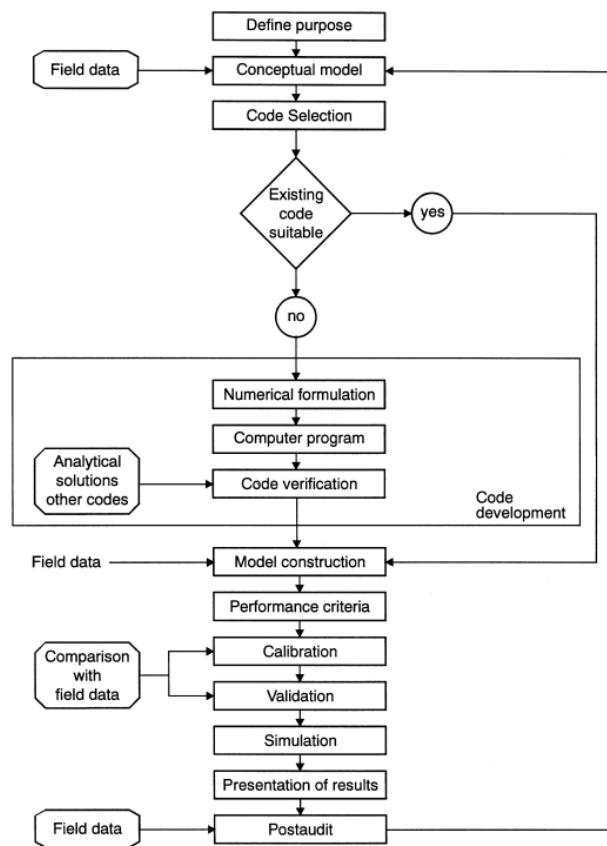


Figura 1-15. Los principales pasos durante la modelización hidrológica (Refsgaard, 1997).

Con el objetivo de facilitar este trabajo, surgieron las herramientas de **autocalibración** orientadas a la modelización hidrológica, las cuales están siendo un aspecto muy desarrollado durante las últimas décadas (Madsen y Jacobsen, 2001). Ayudan considerablemente a la hora de calibrar los parámetros de un modelo, ahorrando gran parte del esfuerzo que supone una calibración manual (van Liew et al., 2005). Entre las herramientas de autocalibración más

conocidas están PEST (Doherty et al., 1994) y UCODE (Poeter y Hill, 1998). Concretamente, PEST ha sido empleada en numerosos estudios, en los que se han calibrado modelos construidos con los códigos MODFLOW (Elci et al., 2010), MIKE SHE (Madsen y Jacobsen, 2001) o SWAT (Muleta, 2010). En otras ocasiones, se emplean programas menos complejos capaces de realizar este tipo de calibración, no obstante, en cualquier caso es necesario que hayan sido especificados los siguientes aspectos:

- Parámetros a calibrar y un rango de valores aceptables
- Criterio de calibración
- Algoritmo de optimización

En cuanto al criterio de calibración se refiere, si bien es cierto que la función objetivo más empleada es la suma de los errores cuadrados, RMSE (Madsen y Jacobsen, 2001), cada vez son más frecuentes los programas de autocalibración que consideran más de una función objetivo (Madsen, 2000).

El programa de autocalibración repite este proceso hasta que se cumple el criterio definido (Figura 1-16). Se emplean distintas variables en función del modelo a calibrar, no obstante, es recomendable, además de la descarga medida en el outlet de la cuenca, emplear también variables distribuidas (como son el nivel freático o el contenido hídrico) para obtener una calibración más adecuada.

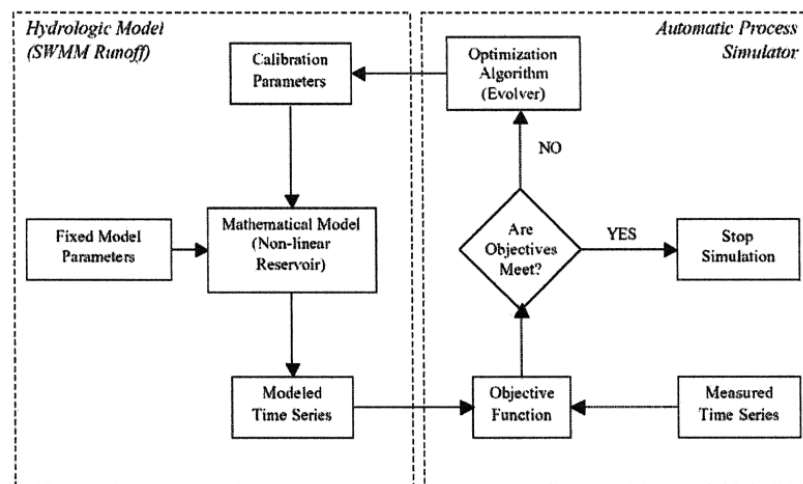


Figura 1-16. Proceso de autocalibración (Dent et al., 2004).

Una vez el modelo ha sido calibrado, es necesario llevar a cabo su **validación**, proceso por el que se verifica si el valor de los parámetros ajustados simula buenos resultados en periodos diferentes a aquellos empleados durante la calibración. Una vez el modelo ha sido validado, pueden realizarse simulaciones de predicción con las que concluir el objetivo de estudio. La metodología relacionada a la calibración y validación ha sido objeto de discusión durante las últimas décadas, y son pocos los autores que han descrito las pautas a seguir de una forma rigurosa (Anderson y Woessner, 1992; Refsgaard, 1996). Teóricamente, suele considerarse una última etapa **post-audita**, la cual debe llevarse a cabo años después del estudio en sí, que evalúa con nuevos datos de campo si el modelo es robusto o el modelo conceptual planteado en

su momento no considera los aspectos necesarios para obtener resultados satisfactorios (Anderson y Woessner, 1992).

1.3.2. Modelización de procesos a nivel de cuenca

En la actualidad existe un gran número de códigos orientados a la modelización de procesos de flujo, transporte y de transformación de nutrientes a nivel de cuenca. Hay que considerar, por ello, que sin importar el tipo de modelo empleado para la modelización del flujo y transporte, la modelización de la transformación de nutrientes (ya sea mediante el ciclo de organismos, o no) se realiza, generalmente, mediante modelos conceptuales. No obstante, cuanto más realistas tratan de ser estos modelos (representar de forma más precisa los procesos que ocurren en un sistema), van incorporando un conjunto de parámetros que rara vez pueden ser medidos en campo, por lo que en muchas ocasiones, se convierten en factores que contribuyen al error cometido durante la modelización, afectando así, al resultado del modelo. En la Figura 1-17 se muestra la precisión y confianza de los modelos hidrológicos, de transporte y de transformación mediante microorganismos según D'Arcy y Frost (2001), de los cuales se observa cómo la confianza decrece a medida que aumenta la complejidad del modelo o el tamaño del sistema modelizado.

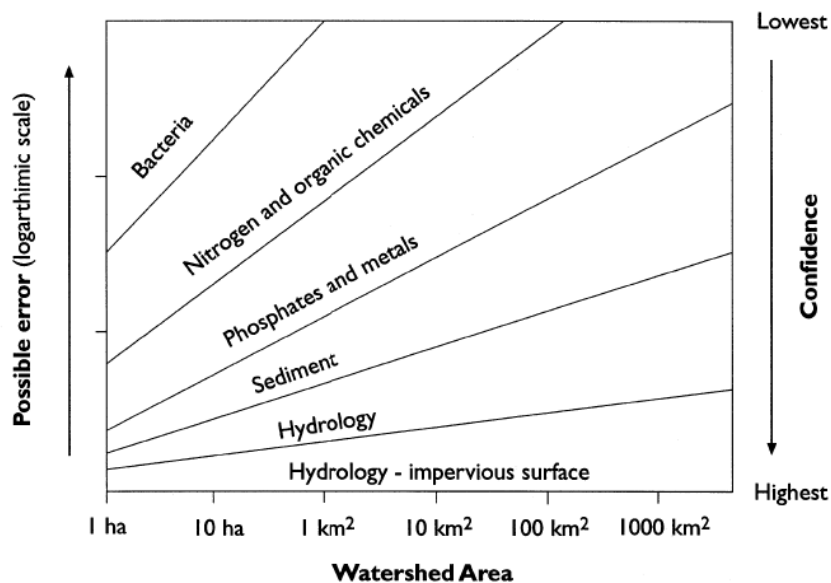


Figura 1-17. Precisión y confianza de los modelos hidrológicos y de calidad (D'Arcy y Frost, 2001).

La literatura abarca múltiples estudios relacionados con los contaminantes de origen agrícola y los códigos existentes han sido ampliamente discutidos y comparados con el fin de evaluar su aptitud a la hora de representar los procesos que en mayor medida repercuten sobre la hidrología y la contaminación agrícola de una cuenca (Borah y Bera, 2003; Cornelissen et al., 2013).

De tal manera, se pueden encontrar desde códigos simples enfocados a la simulación de procesos concretos, a sistemas integrados o combinaciones de diferentes códigos, con los que se consigue simular los procesos de forma independiente para ser posteriormente acoplados.

Debido a la complejidad de crear sistemas de modelización integrados de cuenca, la variedad es bastante limitada, distinguiéndose entre otros, los códigos INCA (Whitehead, 1998), SWAT (Arnold et al., 1998) y MOHID Land (Braunscweig et al., 2004). Por el contrario, los códigos más simples, son mucho más abundantes y la representación a nivel de cuenca suele conseguirse mediante el **acoplamiento** de los mismos. En la literatura pueden encontrarse los siguientes ejemplos:

- Wolf et al. (2003) acoplaron AMINO (Groenendijk y Kroes, 1999; simula el ciclo del C y nutrientes en el suelo) y SWAP (van Dam, 1997; simula el drenaje de la zona no saturada).
- Arheimer and Brandt (2000) acoplaron SOIL-N y HBV (Bergstrom, 1992; es un código hidrológico semi-distribuido que simula la escorrentía a nivel de cuenca).
- Perkins y Sophocleous (1999) acoplaron SWAT y MODFLOW (McDonald y Harbaugh, 1988).
- Conan et al. (2003) acoplaron MT3DMS (Zheng, 1990; es un código hidrogeológico modular 3-D que simula el transporte de contaminantes) y MODFLOW.
- Styczen y Storm (1993) acoplaron DAISY y MIKE SHE.

Otros de los códigos más conocidos no citados en estas combinaciones son: SHE (Abbott et al., 1986), MIKE SHE (Refsgaard y Storm, 1995), SHETRAN, (Ewen et al., 2000), TOPMODEL (Beven y Kirkby, 1979), THALES (Grayson et al., 1992), HEC-HMS (USACE, 1998) y Hydrus (Simunek et al., 1998).

1.3.2.1. MODELIZACIÓN DE LA MATERIA ORGÁNICA

El estudio conjunto de la dinámica del N y del C es de gran importancia para los modelos predictivos de la evolución de la materia orgánica del suelo (Rodríguez-Iturbe et al., 2001). Por ello, estos modelos intentan simular los procesos y transformaciones más importantes dentro del ciclo de estos nutrientes. Desde su aparición en la década de los 30 se han desarrollado más de 250 códigos diferentes, los cuales varían en gran medida en términos de complejidad y descripción matemática de los procesos biológicos y geoquímicos representados (Manzoni and Porporato, 2009).

En su mayoría construyen modelos que son parcialmente físicos y parcialmente empíricos (Cabrera et al., 2008), pues a pesar de que son modelos físicos los que simulan ciertos procesos (flujo de agua y transporte de nutrientes), otros (ciclo de nutrientes, absorción de la vegetación) son modelizados necesariamente mediante ecuaciones empíricas. A pesar de que estos modelos puedan ser clasificados en base a diferentes criterios (Ford, 1999) en el presente apartado se clasifican en función de la estructura interna que describe la dinámica de la MO. De esta forma, se distinguen (Paustian, 1994; McGill, 1996; Brussaard, 1998; Smith et al., 1998):

- Modelos de compartimentos basados en procesos
- Modelos orientados al crecimiento de los organismos
- Modelos de cohorte que describen la descomposición como un continuo

Los **modelos de compartimentos basados en procesos** consideran que la MO está dividida en diferentes fracciones cuyas características físicas y bioquímicas son similares. Cada

una de estas fracciones constituye los diferentes reservorios de N, C o los demás nutrientes considerados por el modelo y los procesos de migración y transformación entre éstos son frecuentemente simulados mediante cinética de primer orden. Estos modelos pueden tener diferente grado de complejidad, estando compuestos por un único reservorio, en el caso más simple, hasta por diversos reservorios correspondientes a diferentes nutrientes, en el caso más complejo. Además, cabe destacar que, en la mayoría de los casos, es muy difícil establecer una relación entre estos reservorios conceptuales y las diferentes fracciones de MO medidas en campo, por lo que la evaluación del contenido simulado de cada reservorio está bastante limitado (Christensen, 1996; Elliott et al., 1996). Entre los códigos más conocidos de este tipo son CANDY (Franko, 1996), CENTURY (Parton et al., 1988), RothC (Post et al., 1982), DAISY (Hansen et al., 1991), SOILN (Johnsson et al., 1987), SWAT (Arnold et al., 1998) y TNT2 (Beaujouan et al., 2002).

En los **modelos orientados a la actividad de los organismos**, la MO también está dividida en diferentes reservorios, con la diferencia de que en este caso las diferentes familias de microorganismos están explícitamente simuladas, constituyendo también diferentes reservorios del modelo. Así, las tasas de transformación de nutrientes entre los reservorios se basan en la actividad microbiana, siendo cada familia responsable de un tipo de transformación con unas tasas de degradación concretas. Este tipo de modelo implica la caracterización de las familias de microorganismos, requiriendo técnicas más complejas para establecer los reservorios contemplados en cada caso (Batlle-Aguilar et al., 2011). Estas diferencias con respecto a los modelos de compartimentos basados en procesos hacen que aquellos sean más fáciles de aplicar y calibrar, explicando su mayor popularidad (Batlle-Aguilar et al., 2011). Los códigos RZWQM (Ahuja et al., 1999) y el módulo Sediment Quality de MOHID Land (Braunschweig et al., 2004) son un ejemplo de este tipo.

Los **modelos de cohorte** (*cohort model*) son modelos que dividen la MO en distintos grupos con ciertas características en común y, a su vez, en distintos reservorios de nutrientes como el nitrógeno o el carbono. Estos modelos consideran explícitamente la fisiología de los microorganismos, pero en lugar de simular las transformaciones mediante cinéticas de primer orden, simulan la evolución de la magnitud de cada reservorio en función de la característica establecida. El código SOMKO (Gignoux et al., 2001) es un ejemplo de este tipo y simula la transformación de nutrientes en base a los grupos de microorganismos de la misma edad. Así, en cada paso temporal del modelo se crea grupo nuevo y se simula la cantidad de nutrientes degradados en base a su evolución fisiológica.

La mayoría de los códigos que simulan la **transformación del nitrógeno** lo hacen mediante compartimentos basados en procesos, aproximación que resulta tener una aplicación mucho más sencilla. Además, la experiencia adquirida de los estudios llevados a cabo mediante modelos con este tipo de conceptualización del N ha demostrado que los modelos más complejos y con mayor división de compartimentos o reservorios, no tienen por qué dar mejores resultados (Batlle-Aguilar et al., 2011).

Si bien es cierto que la mayoría de los modelos simulan las tasas de transformación mediante **ecuaciones de cinética** de primer orden, existen otros tipos de cinética comúnmente

usados para simular los procesos que constituyen el ciclo del nitrógeno. Así, se distinguen entre las siguientes aproximaciones cinéticas más empleadas (Cabrera et al., 2008):

Cinética de orden cero

Mediante este tipo de cinética la velocidad de la transformación de un compuesto C a un producto P es constante e independiente de la concentración de C (Ecuación 1-13):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -k[C]^0 = -k \tag{1-13}$$

Donde:

C es la concentración de un compuesto (M L⁻³),

t es el intervalo temporal (T),

k es la constante de velocidad, también conocida como coeficiente de velocidad (M T⁻¹).

Integrando la ecuación anterior, quedaría la Ecuación 1-14:

$$C_t = C_0 + kt \tag{1-14}$$

Donde:

C_t es la concentración de un compuesto en el tiempo t (M L⁻³),

C₀ es la concentración de un compuesto en el tiempo 0 (M L⁻³),

t es el intervalo temporal (T),

k es la constante de velocidad (M T⁻¹).

Cinética de primer orden

Mediante la cinética de primer orden, se considera que la tasa de transformación del compuesto C al producto P es proporcional a la concentración de C (Ecuación 1-15).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -k[C]^1 = -kC \tag{1-15}$$

Integrando esta ecuación, queda la Ecuación 1-16.

$$C_t = C_0 e^{-kt} \tag{1-16}$$

Cinética de segundo orden

Existen dos tipos de cinética de segundo orden. Por un lado, la que calcula la tasa de transformación del compuesto C al producto P como el cuadrado de la concentración de C (Ecuación 1-17; Ecuación 1-18) y, por otro, la que calcula la transformación de C a P como proporcional a la concentración de C y a la concentración de la biomasa microbiana B (Ecuación 1-19; Ecuación 1-20).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -k[C]^2 \tag{1-17}$$

$$C_t = \frac{C_0}{C_0 kt + 1} \tag{1-18}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -k[C][B] \tag{1-19}$$

$$C_t = C_0 \exp \left\{ \left(\frac{kB_0}{r} \right) [\exp(rt) - 1] \right\} \quad (1-20)$$

Donde:

B es la concentración de la biomasa microbiana en el tiempo t (M L⁻³),

B₀ es la concentración de la biomasa microbiana en el tiempo 0 (M L⁻³),

r es la constante de velocidad para el crecimiento de la población microbiana (M T⁻¹).

Cinética Michaelis-Menten

La cinética Michaelis-Menten se desarrolló con el objetivo de explicar una reacción que abarca un compuesto, una encima y un producto, de tal manera que la formación del producto P depende del compuesto C y de la enzima E (Ecuación 1-21).

$$\frac{\partial P}{\partial t} = k[ES] \quad (1-21)$$

Donde:

P es la concentración del producto (M L⁻³),

t es el intervalo temporal (T),

k es la constante de velocidad (M T⁻¹),

ES es el complejo enzima-sustrato (M L⁻³).

Tomada una serie de asunciones, la Ecuación 1-21 da lugar a la Ecuación 1-22, la cual representa la expresión más conocida de la cinética Michaelis-Menten.

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{V_m[C]}{K_m + [C]} \quad (1-22)$$

Donde:

P es la concentración del producto (M L⁻³),

t es el intervalo temporal (T),

C es la concentración del compuesto (M L⁻³),

V_m es la velocidad máxima de reacción (M T⁻¹),

K_m es la constante de Michaelis-Menten, la cual representa la concentración con la cual se consigue la mitad de la velocidad o tasa máxima de transformación (M L⁻³).

Cuando la concentración del compuesto es muy baja, el término K_m+C es aproximadamente igual a K_m y la ecuación toma forma de cinética de primer orden. Cuando, por el contrario, la concentración es muy alta, el término K_m+C es aproximadamente igual a C y la ecuación toma forma de cinética de orden cero. Este tipo de cinética suele emplearse para simular la transformación de sustratos presentes en la disolución del suelo.

Cinética Monod

En la cinética Monod la tasa de transformación del compuesto C es proporcional a la tasa de crecimiento de la población bacteriana B que usa el compuesto C. La tasa de crecimiento de la población bacteriana viene definida por la Ecuación 1-23 y la tasa de transformación del compuesto C, por la Ecuación 1-24.

$$\frac{\partial B}{\partial t} = B * \frac{V_m[C]}{K_m + [C]} \quad (1-23)$$

Donde:

B es la población bacteriana (M),

t es el intervalo temporal (T),

V_m es la velocidad máxima de reacción ($M T^{-1}$),

K_m es la constante de Michaelis-Menten, la cual representa la concentración con la cual se consigue la mitad de la velocidad o tasa máxima de transformación ($M L^{-3}$).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{-\partial B}{\partial t} * \frac{1}{Y} \quad (1-24)$$

Donde:

Y es la eficiencia de la biomasa B (crecimiento de la biomasa/sustrato usado).

En la presente Tesis Doctoral la modelización de la transformación de nutrientes se lleva a cabo mediante modelos que consideran la materia orgánica como una serie de compartimentos basados en procesos. Por este motivo, a continuación, se mencionan las principales simplificaciones asumidas por este tipo de modelos.

- A pesar de que cada población de microorganismos degrade (transforme) cada compuesto con una tasa específica y muy variable, al no considerarse las diferentes poblaciones que llevan a cabo estos procesos, las tasas de transformación representan la transformación media producida por todo el conjunto de microorganismos del suelo. Así, las tasas de transformación entre los distintos reservorios representan una tasa media simulada mediante uno de los tipos de cinética de entre los descritos anteriormente.
- A pesar de que cada tipo de residuo vegetal tenga un ratio C:N específico y, por lo tanto, una tasa diferente de descomposición, este tipo de modelos suelen considerar un ratio constante y, por lo tanto, una única tasa de descomposición.

En los apartados correspondientes a la descripción de los códigos empleados en esta Tesis Doctoral, quedan detalladas las características específicas de la conceptualización de la materia orgánica por los códigos SWAT y MOHID (apartados 2.3.1.1. *Soil and Water Assessment Tool (SWAT)* y 2.3.1.2. *Modelo Hidrodinámico (MOHID)*, respectivamente).

1.4. ORGANISATIONAL SETTING OF THE MANUSCRIPT

1.4.1. General setting

Inadequate agricultural practices have been responsible for water quality degradation in most of the countries of the European Union. The raising awareness by the European Commission led to the implementation of different directives, such as the Nitrates Directive (1991) or the Water Framework Directive (2000), which aim to protect water quality across Europe by preventing nitrates from agricultural sources polluting ground and surface waters and by promoting the use of good farming practices.

The selection of the measures included in this kind of protection plans can be assessed by the numerical tools which, in the last decades, have evolved to complex and integrated watershed scale models able of accurately simulating the hydrological and water quality related processes occurring in agricultural lands.

In the particular case of the Basque Country, the Basque Government created in the year 1998 a groundwater monitoring system as part of the Hydrological and Water Quality Data Network (www.telur.es/redbas). It carries out among others, water quality monitoring and analysis, and groundwater head level measurements, which are gathered in annual reports.

This thesis has been financed for the period January-2011 to January-2015 by the Environment, Territorial Planning, Agriculture and Fishing Department of the Basque Government now included within the Department of Economic Development and Competitiveness, who supports the scientific knowledge of environmental pollution related topics with this kind of research programs. Specifically, this thesis is focused in the numerical modeling of the Alegria River watershed, a nitrate vulnerable zone that is subject to special interest by the authorities since the agriculture-derived pollution problem was identified.

1.4.2. Objectives

The main objective of this thesis was to **study the agricultural management impact on the water quality by different modeling approaches** at a watershed scale. For this purpose, two agro-hydrological codes were selected, one conceptual and the other physics based, which notably differ in terms of the complexity they show to represent watershed hydrological and water quality related processes.

The developed models of the Alegria River watershed, allow to evaluate which of them simulates more accurately the observed data and to identify their suitability for simulating the processes involved on the water quality degradation of the study area. Specific objectives of the thesis are as follow:

- **Study** the main source of the nutrient surpluses and groundwater pollution using a conceptual model.
- **Assess** the ability of the conceptual model to represent the nitrate concentration in the aquifer.
- **Examine** at long-term how agricultural practices' changes affect N dynamics at watershed scale.
- **Develop** a physics-based model to simulate hydrological processes at watershed scale.
- **Test** the nutrient cycling methodology of the physics-based model in terms of both integrated and distributed results.
- **Compare** the conceptual and physics-based models' spatial and temporal discretization differences evidencing the strengths and weaknesses of each code.

- **Analyze** by both conceptual and physics-based models the impact of best management practices on the water quality (both surface and groundwater) and study how the choice of a code can influence above the simulated repercussion of these practices on the environment.

In order to carry out the objectives mentioned above, the SWAT and MOHID numerical codes were selected.

The SWAT code was chosen due to being a semi-distributed conceptual code which computational requirements are low, being a free code, having a simple set up and having shown in countless international publications its accurate performance at simulating hydrological, nutrient transport and nutrient cycling processes at the watershed scale.

On the other hand, the MOHID code was selected due to its integrated nature as a watershed scale and physics-based agro-hydrological and water quality modeling system. It was thought to be an adequate code to construct a fully distributed model which results could evidence SWAT model's strengths and weaknesses.

1.4.3. Structure of the manuscript

The manuscript is divided into six main chapters, the first of them being a general introduction to agricultural ecosystems, the pollution caused by agricultural activity and the modeling approaches related to environmental issues.

In the second chapter an extended description of materials and methods is given. There are detailed the study area and the modeling approaches used on the study. Indeed, the set-up and calibration procedure followed during the construction of SWAT and MOHID models are described.

In a third chapter there are included the results obtained by the SWAT modelization. The work has evolved following specific objectives, which has led to three main stages. The results related to the assessment of the impact of agricultural activity on the water quality are presented by the publication accepted by the *Hydrological Sciences Journal*. Other results cover the modelization of the water table level and spatial variability representation.

In the fourth chapter results obtained with the MOHID model are reported. The most relevant ones are compared to the results obtained with the SWAT model and are included in the publication send to the *Environmental Modelling and Software Journal*. Additional results and discussion conclude with the chapter.

In the fifth chapter the results obtained with the SWAT and MOHID models after the implementation of Best Management Practices (BMP) are presented. Apart from the description of each model's results, a comparison and a discussion are carried out, in which it is evidenced the relevance of the model choice when analyzing BMP scenarios.

The last chapter includes a general discussion of the methodology and results, and the main conclusions obtained from this work, as well as the principal perspectives for the work that will be carried out in the future.

1.5. REFERENCES

- 91/676/EEC, 1991. Directiva 91/676/EEC, relativa a la protección de las aguas contra la contaminación producida por nitratos procedentes de fuentes agrarias.
- Abbott, M.B., Bathurst, J.C., Cunge, J.A., O'Connell, P.E. and Rasmussen, J., 1986. An introduction to the European Hydrological System- System Hydrologique Europeen, "SHE" History and philosophy of a physically-based, distributed modeling system, *Journal of Hydrology*, 87(1-2): 45-59.
- Acutis, M. and Donatelli, M., 2003. SOILPAR 2.00: software to estimate soil hydrological parameters and functions. *European Journal of Agronomy*, 18 (3-4): 373-377.
- Anderson, M.P. and Woessner, W.W., 1992. *Applied groundwater modeling. Simulation of flow and advective transport*. London, United Kingdom. pp. 381.
- Andreu, J., 1993. *Análisis de sistemas y modelación en conceptos y métodos para la planificación hidrológica*. Ed. Joaquín Andreu (CIMNE), Barcelona, Spain. pp. 391.
- Arheimer, B. and Brandt, M., 2000. Watershed modeling of nonpoint nitrogen losses from arable land to the Swedish coast in 1985 and 1994. *Ecological engineering*, 14: 389-404.
- Arnold, J., Srinivasan, R., Muttiah, R. and Williams, J., 1998. Large-area hydrologic modeling and assessment: Part I. Model development. *Journal of American Water Resource Association*, 34: 73-89.
- Averill, B.A. and Tiedje, J.M., 1982. The chemical mechanism of microbial denitrification. *FEBS letters*, 138: 8-12.
- Battle-Aguilar, J., Brovelli, A., Porporato, A. and Barry, D.A., 2011. Modelling soil carbon and nitrogen cycles during land use change. A review. *Agronomy for Sustainable Development Journal*, 31 (2): 251-274.
- Beaujouan, V., Durand, P., Ruiz, L., Arousseau, P. and Cotteret, G., 2002. A hydrological model dedicated to topography-based simulation of nitrogen transfer and transformation: rationale and application to the geomorphology-denitrification relationship. *Hydrological processes*, 16: 493-507.
- Bergström, S., 1992. *The HBV Model: Its Structure and Applications*. Swedish Meteorological and Hydrological Institute (SMHI). Norrköping, Sweden. pp. 35.
- Beven, K., 1989. Changing ideas in hydrology-the case of physically-based models. *Journal of hydrology*, 105: 157-172.
- Beven, K.J. and Kirkby, M.J., 1979. A physically based variable contributing area model of basin hydrology. *Hydrological Sciences Bulletin*, 24(1): 43-69.
- Bora, D.K., and Bera, M., 2003. Watershed-scale hydrologic and non-source pollution models: Review of mathematical bases. *Transactions of the ASAE*, 46(6): 1553-1566.
- Bouraoui, F. and Grizzetti, B., 2014. Modelling mitigation options to reduce diffuse nitrogen water pollution from agriculture. *Science of the Total Environment*, 468-469: 1267-1277.
- Brady, N.C. and Weil, R.R., 2002. *The Nature and Properties of Soils*, 13th ed. Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, EEUU. pp. 980.
- Braunschweig F., Leitao P.C., Fernandes L., Pina P. and Neves R.J.J., 2004. The object-oriented design of the integrated water modelling system MOHID. *Proceedings of the XV international conference on computational methods in water resources*. Elsevier, Chapel Hill, NC, EEUU. pp. 1079-1090.
- Brussaard, L., 1998. Soil fauna, guilds, functional groups and ecosystem processes. *Applications of Soil Ecology*, 9: 123-135.
- Cabrera, M., Molina, J.A. and Vigil, M., 2008. Modeling the nitrogen cycle, chapter 18. In: Schepers, J.S. and Raun, W.R. (Eds.). *Nitrogen in agricultural systems*. Agronomy monograph, 49. Madison, USA. pp. 965.

- Cambardella, C.A. and Elliott, E.T., 1992. Particulate soil organic matter changes across a grassland cultivation sequence. *Soil Science Society of America Journal*, 56: 777-783.
- Campbell, C.A., Paul, E.A., Rennie, D.A. and McCallum, K.J., 1967. Applicability of the carbon-dating method of analysis to soil humus studies. *Soil Sciences*, 104: 217-224.
- Campuzano, F.J., Pierini, J.O., Leitão, P.C., Gómez, E.A. and Neves, R.J., 2014. Characterization of the Bahia Blanca estuary by data analysis and numerical modelling. *Journal of Marine Systems*, 129: 415-424.
- Canter, L.W., 1997. Nitrates in groundwater. Lewis publishers in an imprint of CRC Press. Florida, EEUU. pp. 288.
- Chapelle, F.H., 1992. Ground water microbiology and geochemistry. John Wiley and sons. New Yor, EEUU. pp. 496.
- Chen, C.R., Xu, Z.H. and Zhang, S.L., 2005. Soluble organic nitrogen pools in forest soils of subtropical Australia. *Plan and soil*, 277: 285-297.
- Chen, X., Cui, Z., Fan, M., Vitousek, P., Zhao, M., Ma, W., Wang, Z., Zhang, W., Yan, X., Yang, J., Deng, X., Gao, Q., Zhang, Q., Guo, S., Ren, J., Li, S., Ye, Y., Wang, Z., Huang, J., Tang, Q., Sun, Y., Peng, X., Zhang, J., He, M., Zhu, Y., Xue, J., Wang, G., Wu, L., An, N., Wu, L., Ma, L., Zhang, W. and Zhang, F., 2014. Producing more grain with lower environmental costs. *Nature*, 514: 486-488.
- Chow, V.T., Maidment, D.R. and Mays, L.W., 1988. *Applied Hydrology*. McGraw-Hill. New York, EEUU. pp. 570.
- Christensen, B.T., 1988. Effects of animal manure and mineral fertilizer of the total carbon and nitrogen contents of soil size fractions. *Biology and Fertility of soils*, 5: 304-307.
- Christensen, B.T., 1996. Matching measurable soil organic matter fractions with conceptual pools in simulation models of carbon turnover: revision of model structure. In: Powlson, D.S., Smith, P. and Smith, J.U. (Eds.). *Evaluation os soil organic matter models*. Springer Verlag. Berlin, Germany. pp. 143-160.
- Claver, I., 1984. Guía para la elaboración de estudios del medio físico: Contenido y metodología. Centro de estudios de ordenación del territorio y medio ambiente. 2. Ed. Serie Manuales 3. Madrid, España. pp. 572.
- COM/2006/231. Comunicación de la Comisión al Consejo, al Parlamento Europeo, al Comité Económico y Social Europeo y al Comité de las Regiones - Estrategia temática para la protección del suelo [SEC(2006) 620] [SEC(2006) 1165].
- COM/2006/232. Propuesta de Directiva del Parlamento Europeo y del Consejo por la que se establece un marco para la protección del suelo y se modifica la Directiva 2004/35/CE.
- Conan, C., Bouraoui, F., Turpin, N., de Marsily, G. and Bidoglio, G., 2003. Modeling flow and nitrate fate at catchment scale in Brittany (France). *Journal of environmental quality*, 32: 2026-2032.
- Cornelissen, T., Diekkruger, B. and Giertz, S., 2013. A comparison of hydrological models for assessing the impact of land use and climate change on discharge in a tropical catchment. *Journal of hydrology*, 498: 221-236.
- D'Arcy, B. and Frost, A., 2001. The role of best management practices in alleviating water quality problems associated with diffused pollution. *Science of the Total Environment*, 265: 359-367.
- Dalal, R.C. and Mayer, R.J., 1987. Long-term trends in fertility of soils under continuous cultivation and cereal cropping in Southern Queensland. VI Loss of total nitrogen from different particle size and density fractions. *Australian Journal of Soil Research*, 25: 83-93.
- DeBusk, W.F., White, J.R. and Reddy, K.R., 2001. Carbon and nitrogen dynamics in wetland soils. In: Shaffer, M.J. Ma, L. and Hansen, S. (Eds.). *Modeling Carbon and Nitrogen Dynamics for Soil Management*, CRC Press, Boca Raton, Florida, EEUU. pp. 27-53.
- Deflandre, A. and Jarvie, H., 2006. Nutrients and eutrophication in rivers. In: Solimini, A., Cardoso, A.C., Heiskanen, A.S. (Eds.), *Indicators and methods for the ecological status assessment under the water framework directive. Linkages between chemical and biological quality of surface waters*. EUR 22314 ENEuropean Commission. pp. 248.
- Dent, S., Hanna, R.B. and Wright, L., 2004. Optimization techniques with SWMM RUNOFF. *Innovative modeling of urban water systems*. Monograph, 12: 385-408.
- Doherty, J., Brebber, L. and Whyte, P., 1994. PEST: model independent parameter estimation. *Watermark Computing Trademarks*, Australia. pp. 279.

- Doran, J.W. and Parkin, T.B., 1994. Defining and assessing soil quality. In: Doran, J.W., Coleman, D.C., Bezdicek, D.F., Stewart, B.A. (Eds.). *Defining soil quality for a sustainable environment*. SSSA Special publication 35. Madison, EEUU. pp. 21.
- EEA- European Environment Agency, 2005. *The European environment - State and outlook 2005*. Copenhagen, Denmark. pp. 23.
- Elci, A., Karadas, D and Fistikoglu, O., 2010. The combined use of MODFLOW and precipitation runoff modeling to simulate groundwater flow in a diffuse pollution prone watershed. *Water Sciences Technology*, 62(1): 180-188.
- Elliott, E.T., Paustian, K. and Frey S.D., 1996. Modeling the measurable or measuring the modelable: a hierarchical approach to isolating meaningful soil organic matter fractions. In: Powlson, D.S., Smith, P. and Smith, J.U. (Eds.). *Evaluation of soil organic matter models. Using existing long-term datasets*. Springer. Heidelberg, Germany. pp. 429.
- Esteban, E. and Albiac, J., 2012. Water nonpoint pollution problems in Europe. Agriculture, economics and water quality. *Global Water Forum*. Canberra, Australia. pp. 5.
- Ewen, J., Parkin, G. and O'Connell, P.E., 2000. SHETRAN: a coupled surface/subsurface modeling system for 3D water flow and sediment and solute transport in rivers basins. *Journal Hydrological Engineering*, 5: 250-258.
- Fan, A.M. and Steinberg, V.E., 1996. Health implications of nitrate and nitrite in drinking water: an update on methemoglobinemia occurrence and reproductive and developmental toxicity. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, 23: 35-43.
- Fernández, M., Vela, A. and Castaño, S., 1997. La utilización de modelos en hidrología. *Revista de la Facultad de Educación de Albacete*, 12: 361-318.
- Fohrer, N., Moller, D. and Steiner, N., 2002. An interdisciplinary modelling approach to evaluate the effects of land-use change. *Physics Chemistry Earth*, 27: 655-662.
- Foley, J.A., DeFries, R., Asner, G.P., Barford, C., Bonan, G., Carpenter, S.R., Chapin, F.S., Coe, M.T., Daily, G.C., Gibbs, H.K., Helkowski, J.H., Holloway, T., Howard, E.A., Kucharik, C.J., Chad, M., Patz, J.A., Prentice, I.C., Ramankutty, N. and Snyder, P.K., 2005. Global consequences of land use. *Science*, 309: 570-574.
- Foley, J.A., Ramankutty, N., Brauman, K.A., Cassidy, E.S., Gerber, J.S., Johnston, M., Mueller, N.D., O'Connell, C., Ray, D.K., West, P.C., Balzer, C., Bennett, E.M., Carpenter, S.R., Hill, J., Monfreda, C., Polasky, S., Rockstro, J., Sheehan, J., Siebert, S., Tilman, D and Zaks, D.P.M., 2011. Solutions for a cultivated planet. *Nature*, 478: 337-342.
- Ford, A., 1999. *Modeling the environment*. Island Press. Washington, EEUU. pp. 375.
- Franko, U., 1996. Modelling approaches of soil organic matter within the CANDY system. In: D.S. Powlson, P. Smith, J.U. Smith (Eds.). *Evaluation of soil organic matter models using existing, long-term datasets*, NATO ASI, I38. Springer. Berlin, Germany. pp. 247-254.
- Franzluebbers, A.J., 2002. Soil organic matter stratification ratio as an indicator of soil quality. *Soil Tillage Research*, 66: 95-106.
- Freeman, S., 2008. *Biological science*. Third edition, Pearson Education. San Francisco, EEUU. pp. 839-841.
- Garbuio, J.F., Howard, J. and dos Santos, L., 2012. Impact of human activities on soil contamination. *Applied and Environmental Soil Science*, 2012. pp. 2.
- Giannouli, D.D. and Antonopoulous, V.Z., 2015. Evaluation of two pesticide leaching models in an irrigated field cropped with corn. *Journal of Environmental Management*, 150: 508-515.
- Gignoux, J., House, J., Hall, D., Masse, D., Nacro, H.B. and Abbadie, L., 2001. Design and test of a generic cohort model of soil organic matter decomposition: the SOMKO model. *Global ecology and biogeography journal*, 10: 639-660.
- Grayson, R.B., Moore, I.D. and McMathon, T.A., 1992. Physically-based hydrologic modeling: A terrain-based model for investigative purposes. *Water Resources Research*, 26(10): 2639-2658.
- Groenendijk, P. and Kroes, J.G., 1999. Modelling the nitrogen and phosphorus leaching to groundwater and surface water with ANIMO 3.5. Report 144. DLO-Winand Staring Centre, Wageningen, The Netherlands.
- Gurevitch, J., Scheiner, S.M. and Fox, G.A., 2002. *The Ecology of Plants*. Sinauer Associates. Sunderland, EEUU. pp. 523.

- Hansen S., Jensen, H.E., Nielsen, N.E. and Svendsen, H., 1991. Simulation of nitrogen dynamics and biomass production in winter wheat using the Danish simulation model DAISY. *Fertilizer Research*, 27: 245-259.
- Hayes, M.H.B., McCarthy, P., Malcom, P. and Swift, R.S., 1989. *Humic substances II: In search of structure*. Wiley. New York, EEUU.
- Haynes, R.J., Martin, R.J. and Goh, K.M., 1993. Nitrogen fixation, accumulation of soil nitrogen and nitrogen balance for some field-grown legume crops. *Field crops research*, 35: 85-92.
- Hedges, J.I., Cowie, G.L., Richey, J.E., Quay, P.D., Benner, R., Strom, M. and Forsberg, B.R., 1994. Origins and processing of organic matter in the Amazon River as indicated by carbohydrates and amino acids. *Limnology Oceanography*, 39(4): 743-761.
- Hendrickson, J., Trahan, N., Stecker, E. and Ouyang, Y., 2002. TMDL and PLRG Modeling of the Lower St. Johns River. *Technicas Report Series Volume 1: Calculation of the External Load*. pp. 117.
- Hillel, D., 1998. *Environmental Soil Physics*. Academic Press. San Diego, EEUU. pp. 800.
- Hiscock, K.M., Lloyd, J.W. and Lerner, D.N., 1991. Review of natural and artificial Denitrification of groundwater. *Water Resources*, 25(9): 1099 - 1111.
- Howarth, R., Anderson, D., Cloern, J., Elfring, C., Hopkinson, C., Lapointe, B., Malone, T., Marcus, N., McGlathery, K., Sharpley, A. and Walker, D., 2000. Nutrient pollution of coastal rivers, bays, and seas. *Ecological Society of America*. Washington, EEUU. pp. 15.
- Hsieh, Y.P., 1992. Pool size and mean age of stable soil organic carbon in cropland. *Soil Scientific Society American Journal*, 56: 460-464.
- Isherwood, K.F., 2000. *Fertiliser use and the environment*. Revised edition. International fertiliser industry association. Paris, France.
- Jackson, M.L., 1964. *Análisis químico de suelos* (Traducido por J. Beltrán). Omega. Barcelona, España. pp. 662.
- Jansson, S.L. and Persson, J., 1982. Mineralization and immobilization of soil nitrogen. In: Stevenson, F.J. (ed.). *Nitrogen in agricultural soils*. America Society of Agronomy, Crop Science Society of America, Soil Science Society of America. Madison, EEUU. pp. 229-252.
- Janzen, H.H., 1987. Soil organic matter characteristics after long-term cropping to various spring wheat rotations. *Canadian Journal of Soil Science*, 67(4): 845-856.
- Jenny, H., 1941. *Factors of Soil Formation*, McGraw-Hill Book Co. New York, EEUU. pp. 191.
- Jobbagy, E. and Jackson, R., 2000. The vertical distribution of soil organic carbon and its relation to climate and vegetation. *Ecological Applications*, 10(2): 423-436.
- Johnson, C.J., Bonrud, P.A., Dosch, T.L., Kilness, A.W., Senger, K.A., Busch, D.C. and Meyer, M.R., 1987. Fatal outcome of methemoglobinemia in an infant. *Journal of american medicine association*, 257: 2796-2797.
- Johnson, M.G., Levine, E.R. and Kern, J.S., 1995. Soil organic matter: Distribution, genesis, and management to reduce greenhouse gas emissions. *Water, Air and Soil Pollution*, 82: 593-615.
- Jordan, T.E., Correll, D.L. and Weller, D.E., 1997. Relating nutrient discharges from watersheds to land use and streamflow variability. *Water Resources Research*, 33(11): 2579-2590.
- Johnson, M.G., Levine, E.R. and Kern, J.S., 1995. Soil Organic matter: Distribution, genesis, and management to reduce greenhouse gas emissions. *Water, Air and Soil Pollution*, 82: 593-615.
- Johnsson, H., Bergstrom, L., Jansson, P.E. and Paustian, K., 1987. Simulated nitrogen dynamics and losses in a layered agricultural soil. *Agricultural Ecosystem Environment*, 18: 333-356.
- Killham, K. and Foster, R., 1994. *Soil ecology*. Cambridge University Press. Cambridge, UK.
- Konikow, L.F., 1996. Numerical models of groundwater flow and transport. In: *Manual on Mathematical Models in isotope Hydrogeology*. International Atomic Energy Agency Rept. IAEA-TECDOC-910. Vienna, Austria. pp. 59-112.

- Kookana, R.S. and Naidu, R.M., 1998. Vertical heterogeneity in soil properties and contaminant transport through soil profiles. In: Dillon, P. and Simmers, I. (Eds.). *International contributions to Hydrology: Shallow groundwater Systems*. Rotterdam, The Netherlands. pp. 15-28.
- Kutilek, M. and Nielse, D., 1994. *Soil Hydrology: textbook for students of soil science, agriculture, forestry, geoecology, hydrology, geomorphology or other related disciplines*. Catena Verlag. Cremlingen-Destedt, Germany. pp. 370.
- Lal, R., 2008. Carbon sequestration. *Phil Trans. The Royal Society*, 363: 815-830.
- Liu, Y. and Gupta, H.V., 2007. Uncertainty in hydrologic modeling: Toward an integrated data assimilation framework. *Water resources research*, 43: 1-18.
- Lupwayi, N.Z., Arshad, M.A., Rice, W.A. and Clayton, G.W., 2001. Bacterial diversity in water stable aggregates of soils under conventional and zero tillage management. *Applied Soil Ecology*, 16: 251-261.
- Madigan, M.T., Martinko, J.M. and Parker, J., 2006. *Brock Biology of microorganisms*. Pearson Prentice Hall. San Francisco, EEUU. pp. 1152.
- Madsen, H. and Jacobsen, T., 2001. Automatic calibration of the MIKE SHE integrated hydrological modeling system, 4th DHI Conference, Helsingor, Denmark. 6-8 June.
- Madsen, H., 2000. Automatic calibration of a conceptual rainfall-runoff model using multiple objectives. *Journal of Hydrology*, 235: 276-288.
- Manzoni, S. and Porporato, A., 2009. Soil carbon and nitrogen mineralization: Theory and models across scales. *Soil Biological Biochemistry*, 41: 1355-1379.
- Martinez, M., 2008. *Dinámica espacio-temporal de la calidad de las aguas de la Zona Vulnerable de Vitoria-Gasteiz (País Vasco)*. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- McDonald, M.G. and Harbaugh, A.W., 1988. A modular three dimensional finite difference groundwater flow model. U. S. Geological Survey Techniques of Water Resources Investigations. pp. 83-875.
- McGill, W.B., 1996. Review and classification of ten soil organic matter (SOM) models. In: Powlson, D.S., Smith, P., Smith, J.U. (Eds.). *Evaluation of soil organic matter models using existing long term datasets*. Springer. Berlin, Germany. pp. 111-133.
- Muleta, M.K., 2010. Comparison of model evaluation to develop a comprehensive watershed simulation model. *World environmental and water resources congress*. Providence, EEUU. 16-20 May. pp. 2492-2501.
- Muñoz, B., 2012. *Impacto de fertilizantes y pesticidas en la calidad del suelo y el agua*. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Naninipieri, P., Ascher, J., Ceccherini, M.T., Landi, L., Pietramellara, G. y Renella, G., 2003. Microbial diversity and soil functions. *European Journal of science*, 54: 655-670.
- Neitsch, S.L., Arnold, J.G., Kiniry, J.R. and Williams, J.R., 2009. Soil and water assessment tool theoretical documentation. *Grassland, Soil and Water research laboratory-Agricultural research service*. pp. 647.
- Nemes, A., Rawls, W.J. and Pachepsky, Y.A., 2005. Influence of Organic matter on the estimation of saturated hydraulic conductivity. *Soil Science Society of America Journal*, 69: 1330-1337.
- O'Geen, A. T., 2012. *Soil Water Dynamics*. Soil Resource Specialist in Cooperative Extension Dept. of Land, Air and Water Resources. *Nature Education Knowledge*, 3(6): 12.
- Ogura, N., 1975. Further studies on decomposition of dissolved organic matter in coastal seawater. *Marine Biology* 31: 60-62.
- Ostovari, Y., Asgari, K., Cornelis, W. and Beigi-Harchegani, H., 2015. Simple methods for estimating field capacity using Mamdani inference system and regression tree. *Archives of Agronomy and Soil Science*, 61(6): 851-864.
- Pabich, W. J., Valiela, I. and Hemond, H. F., 2001. Relationship between DOC concentration and vadose zone thickness and depth below water table in groundwater of Cape Cod, USA. *Biogeosciences*, 55(3): 247-268.
- Parton, W.J., Stewart, J.W.B. and Cole, C.V., 1988. Dynamics of C, N, P and S in grassland soils: a model. *Biogeochemistry*, 5: 109-131.

- Paustian, K., 1994. Modelling soil biology and biochemical processes for sustainable agricultural research. In: Pankhurst, C.E., Doube, B.M., Gupta, V.V.S.R. and Grace, P.R. (Eds.). *Soil biota. Management in sustainable farming systems*. CSIRO Information services. Melbourne, Australia. pp. 182-193.
- Perkins, S.P. and Sophocleus, M., 1999. Development of a comprehensive watershed model applied to study stream yield under drought conditions. *Ground water*, 37: 418-426.
- Peters, N.E., Meyers, T.P. and Aulenbach, B.T., 2002. Status and trends in atmospheric position and emissions near Atlanta, Georgia, 1986-99. *Atmospheric Environment*, 36: 1577-1588.
- Pimentel, D., Allen, J., Beers, A., Guinard, L., Linder, R., McLaughlin, P., Meer, B., Musonda, D., Perdue, D., Poisson, S., Siebert, S., Stoner, K., Salazar, R. and Hawkins, A., 1987. *World Agriculture and soil erosion*. Bioscience, 37: 277-283.
- Poeter, E.P., and Hill, M.C., 1998, Documentation of UCODE, a computer code for universal inverse modeling: U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report. Denver, EEUU. pp. 116.
- Polo, M.J., Lafuente, P. and Giráldez, J.V., 2003. Variabilidad espacial de la conductividad hidráulica saturada en suelos de olivar y su influencia en el balance hidrológico global. *Estudios de la Zona No Saturada del Suelo*, 6: 209-214.
- Porta, J., López-Acevedo, M. and Roquero, C., 1994. *Edafología- Para la agricultura y el medio ambiente*. Mundi-Prensa. Madrid, España. pp. 907.
- Post, W. M., Peng, T.-H Emanuel, W. R., King, A. W., Dale, V. H. and De Angelis, D. L., 1990. The global carbon cycle. *American Scientist*, 78: 310-326.
- Post, W.M., Emanuel, W.R., Zinke, P.J. and Stangenberger, A.G., 1982. Soil carbon pools and world life zones. *Nature*, 298: 156-159.
- Powlson, D.S., 1993. Understanding the soil nitrogen cycle. *Soil use and management*, 9: 86-94.
- Refsgaard, J.C. and Storm, B., 1995. MIKE SHE. In: Singh, V.P. (Ed.). *Computer Models of Watershed Hydrology*. Water Resources Publications, Colorado, USA. pp. 809-846.
- Refsgaard, J.C., 1996. Terminology, modelling protocol and classification of hydrological model codes. In: Abbott, M.B., Refsgaard, J.C. (Eds.). *Distributed Hydrological Modelling*. Kluwer Academic. Dordrecht, The Netherlands. pp. 17-39.
- Refsgaard, J.C., 1997. Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models. *Journal of hydrology*, 198: 69-97.
- Refsgaard, J.C., 2007. *Hydrological modeling and river basin management*. Thesis (PhD). Danmarks og Gronlands Geologiske Undersogelse. Geological Survey of Denmark and Greenland. pp. 90.
- Reicosky, D.C., 2007. Carbon is the "C" that starts "C"onservation. South Dakota No-till Association Conference. Huron, EEUU. 31 Jan-1 Feb.
- Richards, I.R., Turner, I.D.S. and Wallace, P.A., 1999. Manure and fertilizer contributions to soil mineral nitrogen and the yield of forage maize. *Nutrient cycling in agroecosystems*, 55: 175-185.
- Rodriguez-Iturbe I. and Porporato, A., 2004. *Ecohydrology of water-controlled ecosystems. Soil moisture and plant dynamics*. Cambridge University Press. Cambridge, United Kingdom. pp. 464.
- Romano, N. and Santini, A., 2002. Field. In: Dane, J.H. and Topp, G.C. *Methods of soil analysis. Part 4: Physical Methods*. Soil Scientific Society American book service. Madison, EEUU. pp. 721-738.
- Rosell, R.A., 1999. *Materia orgánica, fertilidad de suelos y productividad de cultivos*. Proceedings. XIV Congreso Latinoamericano de la Ciencia del Suelo. Pucón, Chile. 3-6 December.
- Rosewell, C.J., 1999. Maintaining soil and water quality. Paper presented to NSW Agriculture, Soil Management Strategic Planning Workshop, Tocal, NSW. Adapted from National Research Council, 1993. *Soil and Water quality: An agenda for agriculture*. National Academy Press. Washington, EEUU.
- Saether, O.M. and Caritat, P., 1997. *Geochemical processes, weathering and groundwater recharge in catchments*. A.A. Balkema, Rotterdam, The Netherlands. pp. 400.
- Samper, J., 2013. *Modelización numérica*. Libro en edición. Con la colaboración de la Universidad de A Coruña.

- Saxton, K.E. and Rawls, W.J., 2009. Soil Water Characteristics: Hydraulic properties calculator [Computational program]. USDA Agricultural Research Service. Version 6.02.74.
- Schachtschabel, P., Blume, H.P., Brummer, G., Hartge, K.H. y Schwertmann, U., 1989. Lehrbuch der Bodenkunde. 12th Edition, Ferdinand Enke, Stuttgart, Germany. pp. 551.
- Schinner, F., Kandeler, E., Öhlinger, R. and Margesin, R., 1995. Methods in soil biology. Springer-Verlag. New York, EEUU.
- Schiff S. L., Aravena R., Trumbore S. E., Hinton M. J., Elgood R. and Dillon P. J., 1997. Export of DOC from forested catchments on the Precambrian Shield of Central Ontario: Clues from 13C and 14C. Biogeochemistry, 36: 43–65.
- Schnitzer, M. and Khan, S.U., 1978. Soil organic matter. Elsevier. New York, EEUU. pp. 319.
- Simpson, A.J., Song, G., Smith, E., Lam, B., Novotny, E.H. and Hayes, M.H.B., 2007. Unraveling the structural components of soil humin by use of solution-state nuclear magnetic resonance spectroscopy. Environmental science and Technology, 41: 876-883.
- Simunek, J., Sejna, M. and van Genuchten, T., 1998. HYDRUS 1-D. The hydrus 1D Software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media. Version 6.0, Research report 144, U.S. Salinity Laboratory, USDA, ARS, Riverside, California. pp. 164.
- Singh, V.P., 1988. Hydrologic Systems, Volume 1: Rainfall-runoff modelling. Prentice Hall. New Jersey, EEUU. pp. 480.
- Skjemstad, J.O., Janik, L.J. and Taylor, J.A., 1998. Non-living organic matter: what do we know about it? Australian Journal of Experimental Agriculture, 38: 667-680.
- Smith, P., Andren, O., Brussaard, L., Dangerfield, Ekschmitt, K., Lavelle, P. and Tate, K., 1998. Soil biota and global change at the ecosystem level: describing soil biota in mathematical models. Global Change Biology, 4: 773-784.
- Sommer, S.G., Schjoerring, J.K. and Denmead, O.T., 2004. Ammonia emission from mineral fertilizers and fertilized crops. Advances in Agronomy, 82: 557-622.
- Styczen, M. and Storm, B., 1993. Modeling of n-movements on catchment scale- a tool for analysis and decision-making. A case study. Fertilizer research, 36: 7-17.
- Tate, R.L., 1987. Soil organic matter. Biological and ecological effects. John Wiley and sons. New York, EEUU. pp. 291.
- Thurman, E.M., 1985. Organic geochemistry of natural waters. Martinus Nijhoff/Dr. W. Junk Publishers. Denver, EEUU. pp. 497.
- U.S. Environmental Protection Agency, 1994. The Water Quality Standards Handbook: Second Edition. Washington, EEUU. pp. 341.
- USACE, 1998. HEC-1 Flood Hydrograph package user's manual. Computer program document. US Army corps of engineers hydrologic engineering center (HEC). pp. 434.
- van Dam, J.C., Huygen, J., Wesseling, J.G., Feddes, R.A., Kabat, P., van Walsum, P.E.V., Groenendijk, P. and van Diepen, C.A., 1997. Theory of SWAP version 2.0. Simulation of water flow, solute transport and plant growth in the soil-water-atmosphere-plant environment. Wageningen, The Netherlands. pp. 153.
- van Liew, M.W., Arnold, J.G. and Bosch, D.D., 2005. Problems and potential of autocalibrating a hydrologic model. Transactions of the ASAE, 48(3): 1025-1040.
- van Veen, J.A., Ladd, J.N. and Frissel, M.J., 1984. Modelling C and N turnover through the microbial biomass of soil. Plant and Soil, 76: 257-274.
- Walls, M., 2006. Agriculture and environment. Agrifood research, SCAR Foresight Group. Finland.
- Wetzel, R.G., 1983. Limnology. Second Ed. CBS College Publishing. New York, EEUU. pp. 767.
- Whitbread, A.M., 1995. Soil organic matter: its fractionation and role in soil structure. Soil Organic Matter Management for sustainable agriculture. ACIAR Proceedings No. 56. Ubon, Thailand. 24-26 August.
- Whitehead, P.G., Wilson, E.J. and Butterfield, D., 1998. A semi-distributed integrated nitrogen model for multiple source assessment in catchments (INCA): Part I- model structure and process equations. The science of the total environment, 210-211: 547-558.

Wolf, J., Beusen, A.H.W., Groenendijk, P., Kroon, T., Rotter, R. and van Zeijts, H., 2003. The integrated modeling system STONE for calculating nutrient emissions from agricultura in the Netherlands. *Environmental modeling and software*, 18: 597-617.

Zheng, C., 1990. MT3DMS, A modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems. Documentation and user's guide. The United States Environmental Protection Agency. Rockville, EEUU. pp. 169.

Otras Fuentes:

www.boprc.govt.nz. Bay of plenty. Regional Council. Accessed on: 2015/1/22.

www.nrcs.usda.gov. USDA, Soil Survey Staff, Natural Resources Conservation Service, United States Department of Agriculture. Official Soil Series Descriptions. Available online. Accessed on: 2014/10/20.

UPI, United Press International. www.upi.com. Accessed on: 2013/10/18.

www.soils.persiangig.com. Iran Host. Accessed on: 2014/4/20.

2.



MATERIALES Y MÉTODOS

- 2.1. ZONA DE ESTUDIO
- 2.2. TRATAMIENTO DE DATOS
- 2.3. NUMERICAL MODELING
- 2.4. MODELIZACIÓN DE LA CUENCA DEL RÍO ALEGRIA
- 2.5. CONSTRUCCIÓN DE LOS ESCENARIOS CON BUENAS PRÁCTICAS AGRÍCOLAS

2. MATERIALES Y MÉTODOS

Este capítulo describe los materiales y métodos empleados para desarrollar los objetivos del estudio. En primer lugar, se introduce la zona de estudio; su localización y sus características en cuanto a la meteorología y el funcionamiento hidrogeológico, la evolución de la actividad agrícola de la zona y su implicación sobre la contaminación.

Se detalla el tratamiento de datos necesario para su posterior uso durante el proceso de modelización y se describen de los códigos numéricos empleados; SWAT (Soil and Water Assessment Tool) y MOHID (Modelo Hidrodinámico).

En este capítulo también se describe el proceso de modelización llevado a cabo en la presente Tesis Doctoral: el cual abarca desde el set-up de los modelos iniciales (caracterización del sistema y definición de las condiciones iniciales) hasta la propia calibración de los procesos simulados mediante SWAT y MOHID.

Por último, se detallan los escenarios de buenas prácticas agrícolas (BMP) establecidos para su posterior evaluación en cuanto a la simulación de diferentes variables.

2.1. ZONA DE ESTUDIO

2.1.1. Contexto geográfico

2.1.1.1. LOCALIZACIÓN

La zona de estudio se sitúa en la parte más occidental de la denominada “Llanada Alavesa” y concretamente, en la cuenca del río Alegria (provincia de Alava-Araba; País Vasco) abarcando una extensión aproximada de 53 km² (Figura 2-1). Esta zona, corresponde a la parte baja de la cuenca del río Alegria (115 km²) la cual es dividida mediante el Canal del Alegria, estando el agua de la parte alta (ríos Alegria, Arganzubi y Añua) derivada prácticamente en su totalidad al embalse Ullibarri (Figura 2-1).

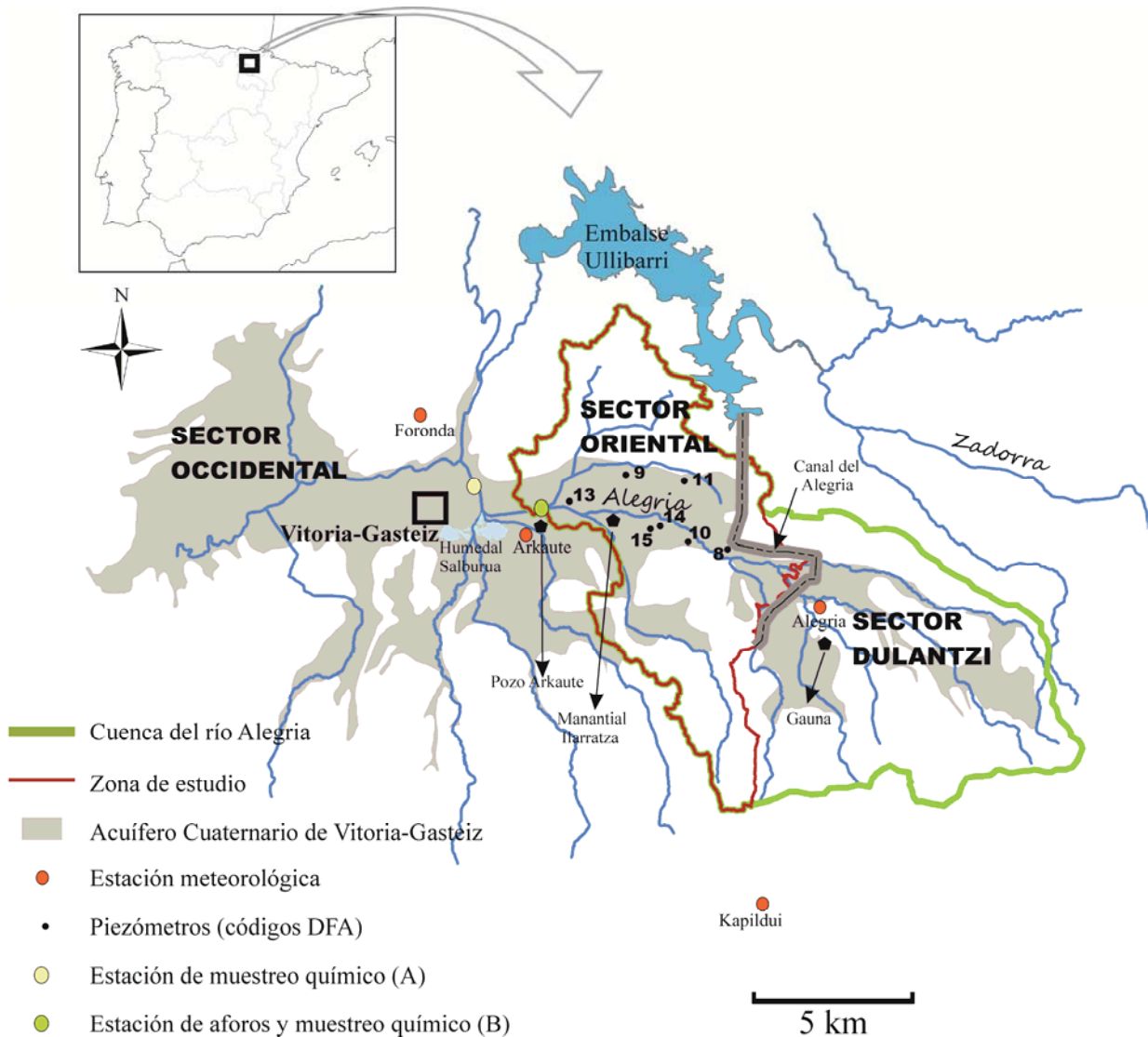


Figura 2-1. Localización geográfica de la zona de estudio, así como la cuenca del río Alegria, el acuífero Cuaternario (Sector Occidental, Oriental y Dulantzi) y los puntos de control (piezómetros, estación de aforos y de muestreo químico, y estaciones meteorológicas).

Topográficamente, la zona de estudio queda limitada por los Montes de Vitoria al sur, Canal del Alegria al este, Embalse de Ullibarri al norte y la ciudad de Vitoria-Gasteiz al oeste. El río Alegria es vertiente del río Zadorra, el cual, tras salir del embalse Ullibarri, traza su curso hacia las inmediaciones de Vitoria-Gasteiz. Precisamente, en esta zona, es donde confluye el Alegria con el Zadorra, cerca de la zona conocida como Eskalmendi y donde se representa la estación de muestreo químico (A) de la Figura 2-1.

2.1.1.2. CLIMATOLOGÍA

El clima de la zona de estudio está considerado como de transición entre el clima oceánico y el mediterráneo. Aún así, predominan las características atlánticas ya que siendo menor el régimen de precipitaciones, no existen veranos totalmente secos (Agencia Vasca de Meteorología, Euskalmet, www.euskalmet.euskadi.net).

En la zona de estudio existen tres estaciones meteorológicas implementadas por Euskalmet (Arkaute, 517 m; Alegria, 545 m; y, Kapildui, 1173 m) (Figura 2-1) y otra, situada en las proximidades de Vitoria-Gasteiz, implementada por la Agencia Estatal de Meteorología (Foronda, 513 m). Esta última, ha sido empleada en lo que al tratamiento de datos se refiere (apartado 2.2. *Tratamiento de datos*).

La precipitación media anual varía en función de la altitud, y varía en un rango de 575-675 mm (1986-2011) considerando las estaciones Alegria, Arkaute y Kapildui. En la Figura 2-2 se muestra la precipitación media anual relativa respecto al valor anual medio (626 mm) de las estaciones de Alegria, Arkaute y Kapildui.

La temperatura presenta una gran variabilidad a nivel diario, llegando a registrarse diferencias de 20°C, y una gran periodicidad a nivel anual. Para el periodo de estudio (1986-2011) el valor medio de la temperatura máxima y mínima diaria es de 16°C y 6°C, respectivamente, siendo durante los meses de enero-marzo cuando se registran las temperaturas más bajas (por debajo de 0°C) y durante los meses de julio y agosto, las más altas (por encima de 25°C).

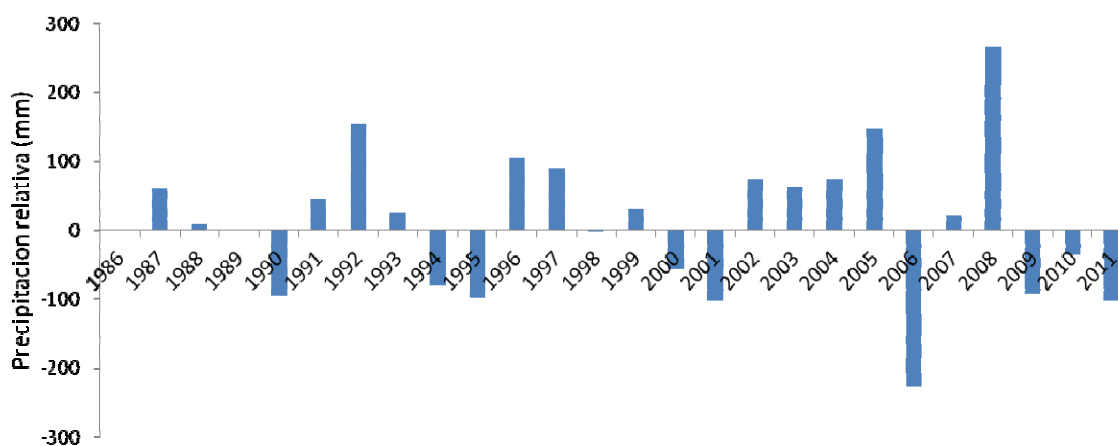


Figure 2-2. Precipitación anual media (estaciones de Alegria, Arkaute y Kapildui) relativa al valor medio anual (626 mm).

2.1.2. Funcionamiento hidrológico de la cuenca

2.1.2.1. MARCO HIDROGEOLÓGICO

La cuenca del río Alegria se sitúa fundamentalmente sobre un acuífero asociado a materiales cuaternarios, el cual constituye una de las Unidades Hidrogeológicas reconocidas en el País Vasco: La Unidad Hidrogeológica de Vitoria-Gasteiz (EVE, 1996). El acuífero, compuesto por depósitos aluviales y fluviales, tiene una geometría en la que se distinguen tres sectores individualizados: Sector Occidental, Sector Oriental y Sector Dulantzi (Arrate, 1994) (Figura 2-1). Mientras que los depósitos aluviales están constituidos por gravas heterométricas, poligénicas y relativamente angulosas incluidas en una matriz arcillo-arenosa, los depósitos fluviales se constituyen por niveles de arcillas con posibles niveles arenosos en la base y que, ocasionalmente, también presentan un nivel de gravas de grano grueso. Por lo general, la potencia media de estos materiales es del orden de 4 m, aunque en el trabajo realizado por Arrate (1994) quedan en evidencia una serie de surcos y umbrales que hacen que la morfología de estos depósitos sea variable. En la Figura 2-3 se muestra el mapa de espesores presentado por el mismo autor. El muro de estos depósitos cuaternarios está constituido por margas del Campaniense Inferior-Medio prácticamente impermeables en la mayor parte del área, las cuales afloran en los bordes del acuífero, y areniscas del Campaniense Superior en la zona sur-oriental.

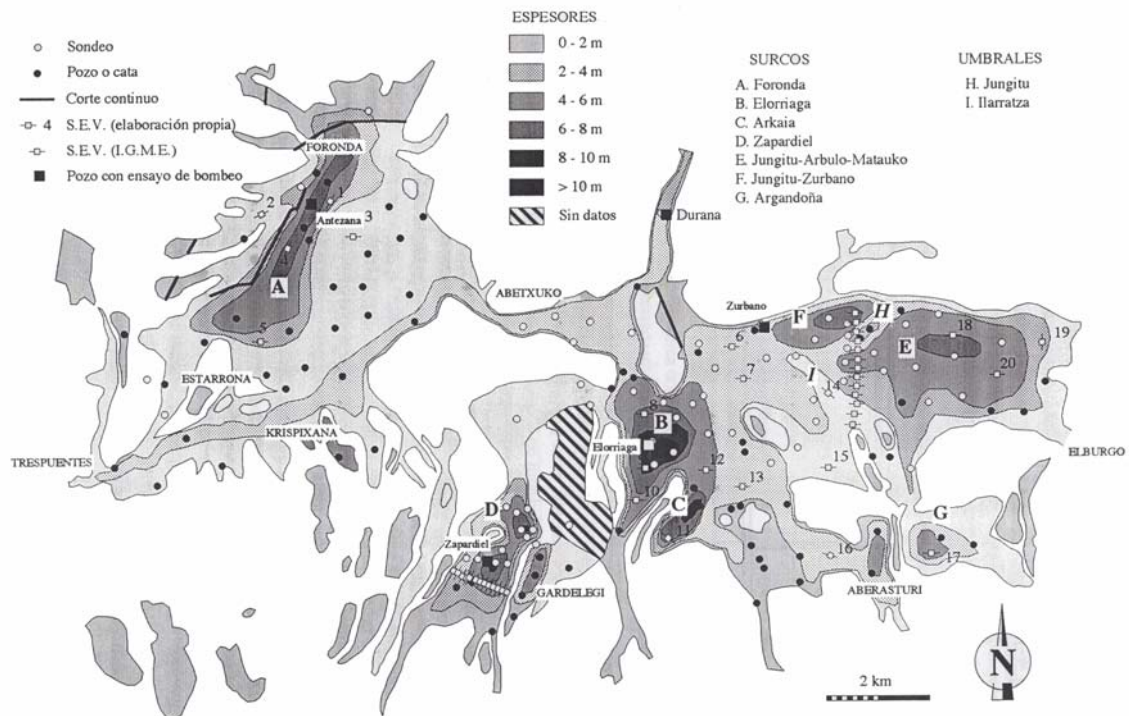


Figura 2-3. Mapa de espesores del Acuífero Cuaternario de Vitoria-Gasteiz (Arrate, 1994).

Este acuífero condiciona en gran medida el funcionamiento hidrológico de la cuenca, pues teniendo un nivel freático tan somero (0-4 m de profundidad) es el que principalmente alimenta los ríos de la zona durante gran parte del año y especialmente, en periodos de estiaje. Concretamente, durante el periodo Oct-09/Sep-11 se estimó en 63% la fracción del caudal

contribuido por el acuífero (Cerro, 2013). Otro aspecto de gran influencia sobre la hidrología de la cuenca, es la existencia del Canal del Alegria (Figura 2-1), el cual capta prácticamente en su totalidad (Cerro, 2013) el agua superficial procedente de la zona sureste (llamada en adelante parte alta de la cuenca) y la deriva al embalse Ullibarri.

Bajo diferentes contextos, en la zona de estudio se han llevado a cabo varios ensayos de bombeo, los cuales han permitido caracterizar los parámetros hidráulicos de los materiales cuaternarios. Tal y como se evidenció, éstos presentan valores bajos de transmisividad (T) y conductividad hidráulica (K) ($2 \text{ m}^2 \text{ día}^{-1}$ y 1.3 m día^{-1} , respectivamente) en las zonas de borde de acuífero, siendo superiores en las zonas centrales ($125 \text{ m}^2 \text{ día}^{-1}$ y 20 m día^{-1} , respectivamente) (IGME, 1971; IGME, 1986; Arrate, 1994). El cambio es atribuido, principalmente, a cambios en la textura y aumento del espesor de los materiales. Hay que destacar también, que existen diversos estudios localizados en la zona más occidental de la zona de estudio, en las inmediaciones del Humedal de Salburua. A pesar de ello, se ha visto que los materiales de esa zona no son representativos de los depósitos cuaternarios, ya que al ser depósitos más arcillosos, presentan valores de T y K mucho menores ($0.01\text{-}0.5 \text{ m}^2 \text{ día}^{-1}$ y $K < 10^{-9} \text{ m día}^{-1}$, respectivamente) (Sánchez-Pérez et al., 2003; Martínez López de Sabando, 2012). El coeficiente de almacenamiento (S_s) tiene un valor aproximado a 0.2 (Arrate, 1994).

Arrate (1994) también estudió los principales mecanismos de recarga y descarga del acuífero, así como la circulación general del agua subterránea. De esta forma, distinguió seis mecanismos de recarga principales para los sectores Oriental y Dulantzi (infiltración de agua de lluvia, excedentes de riego y aguas residuales; infiltración de cuencas laterales; y, comportamiento influente de cursos superficiales en periodos de crecida y de arroyos durante el estiaje) y cuatro de descarga (bombeos, manantiales, acequias de drenaje y evapotranspiración). Este autor, evidenció una circulación subterránea generalizada de sur a norte en la mitad meridional del Sector Oriental y de este a oeste en la septentrional, tal y como lo indica el mapa de isopiezas mostrado en la Figura 2-4.

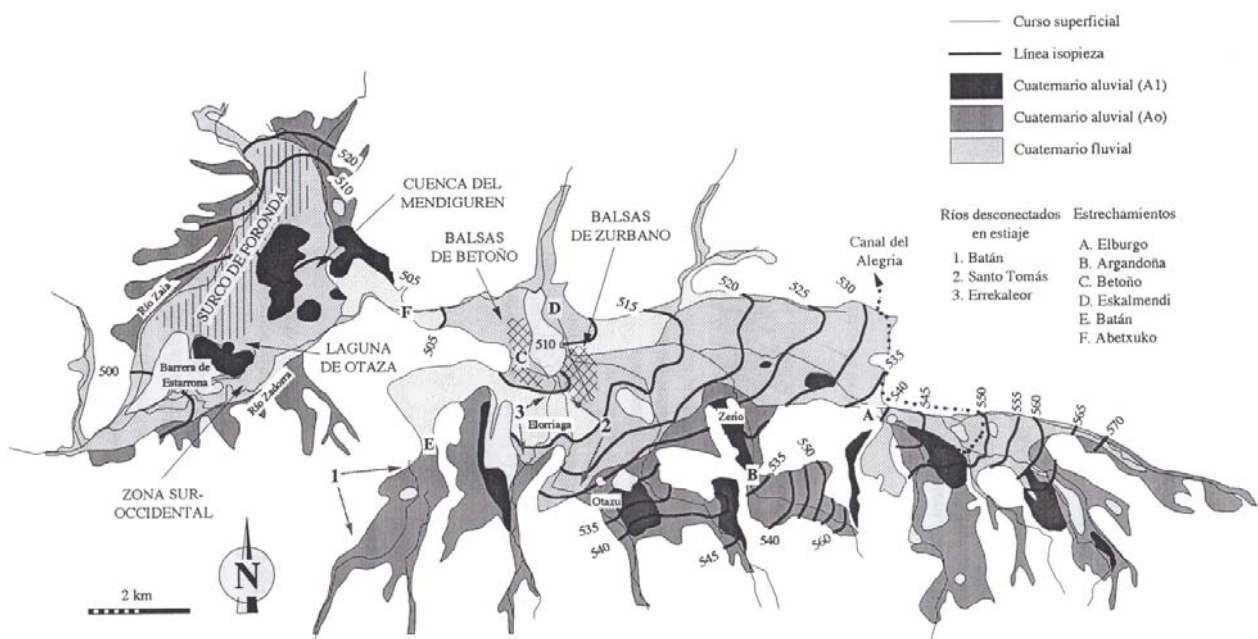


Figura 2-4. Mapa de isopiezas desarrollado por Arrate, 1994.

Este mismo autor fue, además, el primero en modelizar el flujo subterráneo del acuífero cuaternario. Lo hizo a través del código TRANSIN II (Medina et al., 1989) y obtuvo buenos resultados en cuanto a la simulación del comportamiento hidráulico del acuífero se refiere.

Por su parte, Martínez (2008) realizó un estudio acerca de la dinámica espacial y temporal de los niveles piezométricos en diferentes puntos de control, en los que se incluyen dos puntos de la Red Básica de Control de Aguas Subterráneas del Gobierno Vasco y 15 de la Red Piezométrica de la Diputación Foral de Alava (DFA). Así, evidenció la sincronización de las respuestas piezométricas a lo largo del tiempo, siempre con máximos de nivel en periodo invernal y mínimos en verano, con una ciclicidad muy marcada (Figura 2-5). Además, mediante el estudio de datos diezminutales en dos puntos de control, concluyó que un evento de precipitación dado, provocaba recarga del acuífero en función de las condiciones de humedad antecedentes. De tal manera que, en periodos húmedos, una determinada cantidad de lluvia que en periodos secos no tenía efecto sobre el nivel, podía provocar un incremento de nivel considerado. Destacó también la elevada correlación entre los niveles de todos los pozos, algo que atribuyó a una notable homogeneidad en la evolución piezométrica (la Figura 2-5 presenta estos datos actualizados hasta el año 2011) en todo el acuífero, y las diferencias existentes en la respuesta de nivel frente a la precipitación dependiendo de la proximidad del punto de control con respecto a las zonas de descarga.

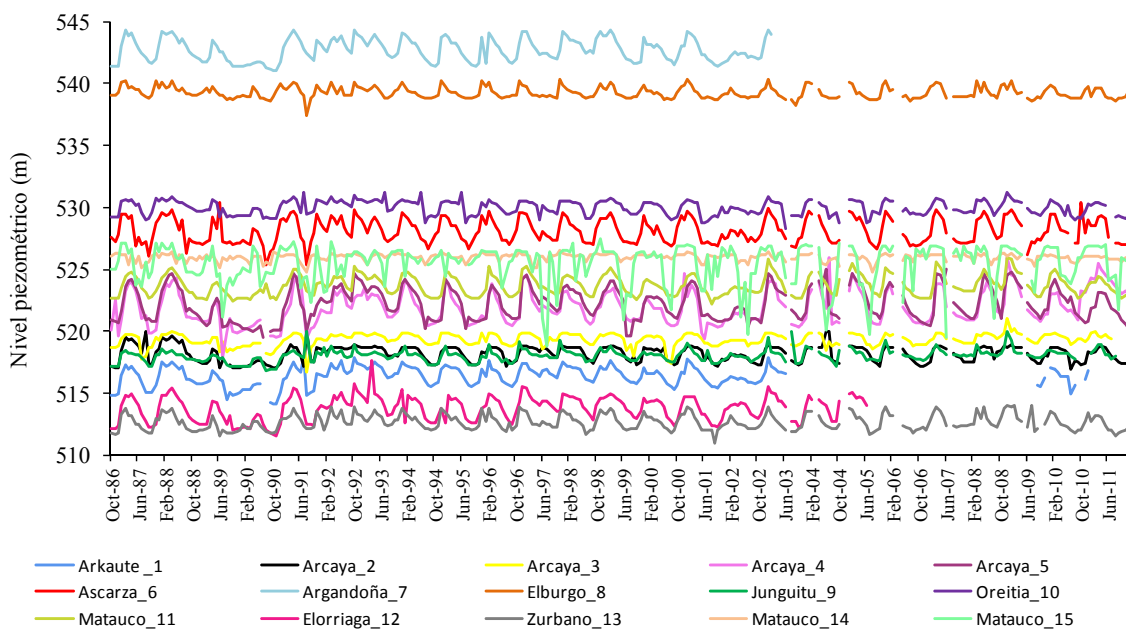


Figura 2-5. Evolución espacio-temporal de los niveles piezométricos medidos en los 15 puntos de control pertenecientes a la Red Piezométrica de la Diputación Foral de Alava (DFA).

Posteriormente, se llevó a cabo un estudio geomorfológico de los cauces bajo el proyecto AGUAFLASH (www.aguaflash-sudoe.eu), el cual fue descrito en la Tesis Doctoral de Cerro (2013). En la Figura 2-6 se muestran los perfiles de los cauces estudiados, donde se puede observar que, por lo general, tanto la anchura como la profundidad aumentan con el descenso del nivel topográfico. Son cauces de dimensiones generalmente pequeñas, destacando el punto de salida o *outlet* en el que la anchura y profundidad miden en torno a 20 y 3 m, respectivamente. Destacar también, que este estudio se realizó en época de estiaje (Julio del

2010) y de ahí la escasa profundidad mostrada en la mayoría de los cauces, que incluso llegan a mostrarse completamente secos (punto 7 de la Figura 2-6).

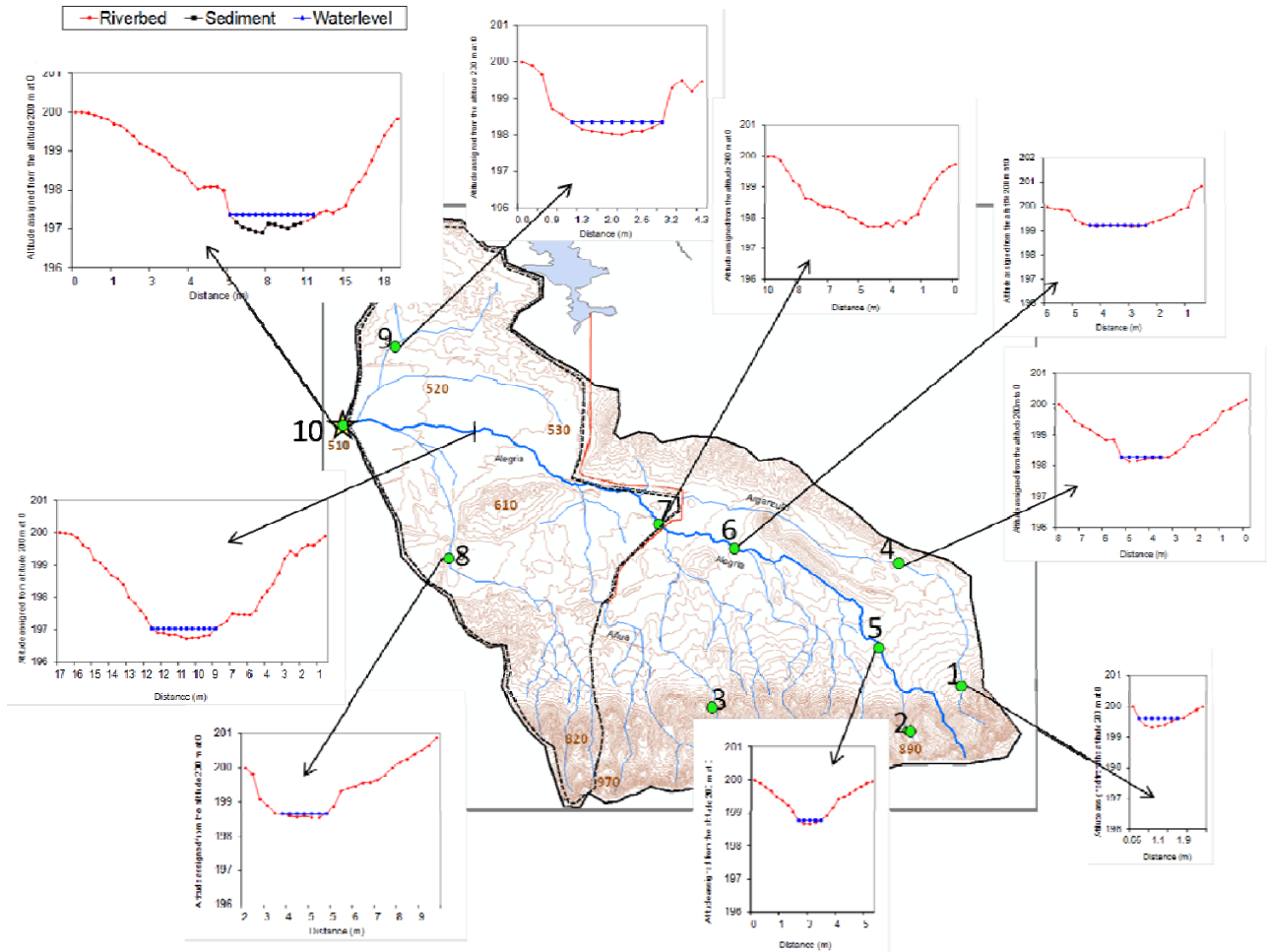


Figura 2-6. Perfiles transversales de los cauces en la cuenca del Río Alegria (Cerro, 2013).

2.1.2.2. DESCRIPCIÓN EDAFOLÓGICA

Los suelos de la zona de estudio están condicionados, principalmente, por dos factores principales. Por un lado, la **composición y dureza** de la roca madre hace que aquellos materiales más difícilmente erosionables (calizas y margocalizas compactas del Coniaciense Medio-Santoniense Inferior) originen suelos poco desarrollados como Regosoles, Litosoles y Rendzinas. Además, estos suelos se localizan en las zonas de mayor **pendiente**, lo que favorece que éstos no se desarrollen tanto, dando lugar a su escasa profundidad. Por otro lado, los materiales que se erosionan más fácilmente (margas, margocalizas y calizas del Santoniense Medio-Superior; margocalizas y calizas nodulosas y margas del Campaniense Inferior-Medio; y los depósitos fluvio-aluviales del Cuaternario) se sitúan en la parte central de la zona de estudio, dando lugar a suelos más profundos y fértiles (Cambisoles y Vertisoles) (Martínez, 2008). Una descripción edafológica detallada puede encontrarse en Martínez (2008) e Iñiguez (1980). Precisamente, con el objetivo de preparar el mapa de entrada para los modelos, se digitalizó la información presentada por Iñiguez (1980), de tal manera que éste abarcara la zona de estudio y los alrededores, tal y como se muestra en la Figura 2-7.

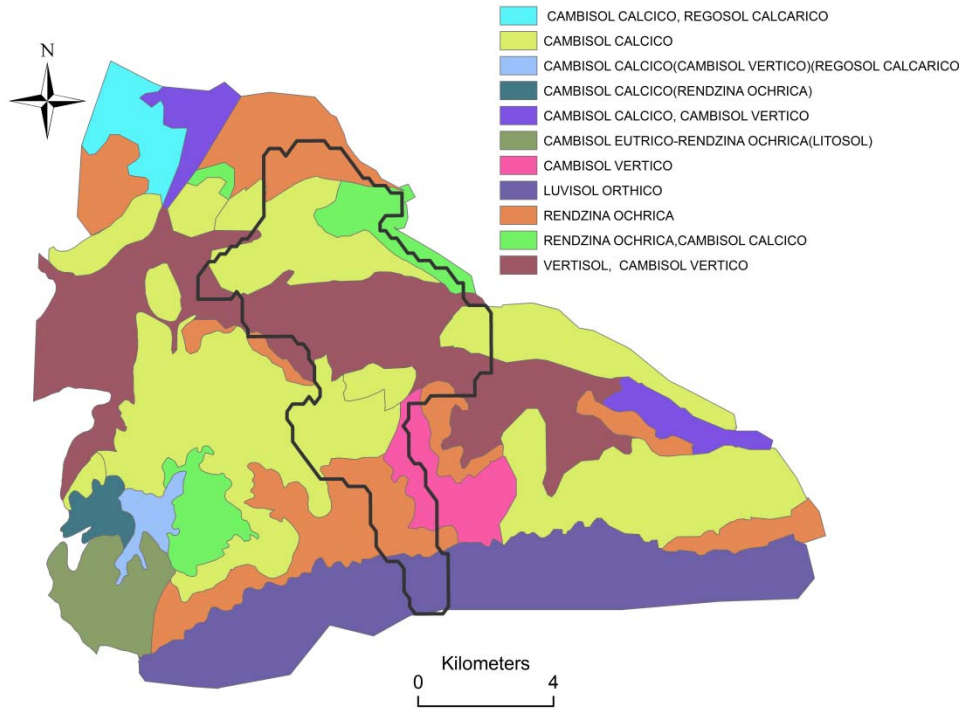


Figura 2-7. Mapa de suelos digitalizado a partir de Iñiguez (1980).

Si bien es cierto que existen numerosas analíticas de suelos, hay que tener presente que compuestos como el contenido de materia orgánica (MO) puede ser altamente variable en función de las prácticas agrícolas que estén teniendo lugar. No obstante, se consideran, por lo general, suelos con bajo contenido en materia orgánica, la cual se encuentra en torno al 1% (Martinez, 2008).

El **carbono orgánico** (CO) concretamente, ha sido medido en la zona de estudio bajo diferentes contextos. De tal forma que, actualmente, se cuenta con una serie de analíticas en el suelo, que demuestran un descenso de CO a medida que aumenta la profundidad (Martinez, 2008; Muñoz, 2012), y también con un estudio sobre la variabilidad temporal del CO en el río Alegria (Cerro, 2013). En una parcela agrícola de Gauna (Figura 2-1) se midieron en el suelo los siguientes valores de carbono orgánico total (Tabla 2-1; Muñoz, 2012):

Profundidad (cm)	Carbono Orgánico (%)
0-30	0.95
30-60	0.74
60-90	0.44

Tabla 2-1. Contenido de carbono orgánico en una parcela agrícola (Muñoz, 2012).

2.1.3. Usos del suelo

Tal y como lo documentaron la Tesis Doctorales de Arrate (1994), Martinez (2008) y Cerro (2013), la cuenca ha sufrido una constante evolución en lo que a los usos del suelo se refiere. No obstante, hace décadas que el uso mayoritario de la zona es el agrícola. (Tabla 2-2; Figura 2-8; Figura 2-9).

Hoy en día las tierras arables se extienden sobre los suelos más fértiles y de mayor profundidad, quedando localizados en la zona central de la cuenca y, por lo tanto, también de la zona de estudio. El uso forestal, también de gran importancia, se localiza en la zona sur de la cuenca y se limita prácticamente a zonas de mayor pendiente. Otro tipo de uso de suelo, así como masas de agua y zonas urbanas, son otro tipo de uso visible en la cuenca, no obstante, la extensión ocupada por éstos es prácticamente despreciable comparándola con los usos anteriormente mencionados. De la misma manera, existen otros usos minoritarios que debido a la baja extensión que ocupan, pueden ser despreciados considerando los objetivos de este estudio (praderas, huertas, frutales, invernaderos...).

Código SIGPAC	Descripción	Extensión (Km ²)	%
TA	Tierra arable	35.5	67
FO	Forestal	9.1	17
PR	Pasto arbustivo	3	6
CA	Viales	2.2	4
ZU	Zona urbana	1.7	3
AG	Corrientes y superficies de agua	0.5	1
IM	Improductivos	0.6	1
PA	Pasto con arbolado	0.2	0
ED	Edificaciones	0	0
IV	Invernaderos	0	0
PS	Pastizal	0	0
TH	Huerta	0	0
VI	Viñedo	0	0
FY	Frutal	0	0
		53	100

Tabla 2-2. Usos del suelo y extensión ocupada en la zona de estudio.

A principios de los años 80, los cultivos de regadío (esencialmente patata y remolacha azucarera) predominaban frente a los de secano (mayoritariamente trigo, cebada y avena), ocupando un 70 y 10-15% de la extensión de la cuenca, respectivamente. En los años sucesivos, el área ocupada por los cultivos de secano fue en aumento, de tal manera que para los últimos años de los 90, los cultivos de secano eran los predominantes, abarcando un 62% de la cuenca respecto a un 26% ocupado por cultivos de regadío.

Si bien es cierto que desde últimos de los 90 hasta mediados de 00, la extensión ocupada por los cereales prácticamente no sufrió prácticamente ningún cambio, aquella ocupada por los cultivos de regadío fue mostrando un progresivo descenso, llegando a representar únicamente el 17% de la extensión total (Martínez, 2008).

De forma generalizada, se observa una tendencia al descenso de cultivo de regadío a lo largo de los años, manteniéndose bastante regular la extensión ocupada por los de secano. En cualquier caso, la extensión ocupada por los distintos cultivos de regadío es bastante similar, siendo la de la remolacha ligeramente superior.

En el caso de los cultivos de secano, por el contrario, se observa una notable diferencia, y la extensión ocupada por el trigo, destaca fuertemente sobre la ocupada por la cebada y avena. En la Tabla 2-3 se muestra la distribución de cada tipo de cultivo con respecto a las tierras arables de la zona de estudio.

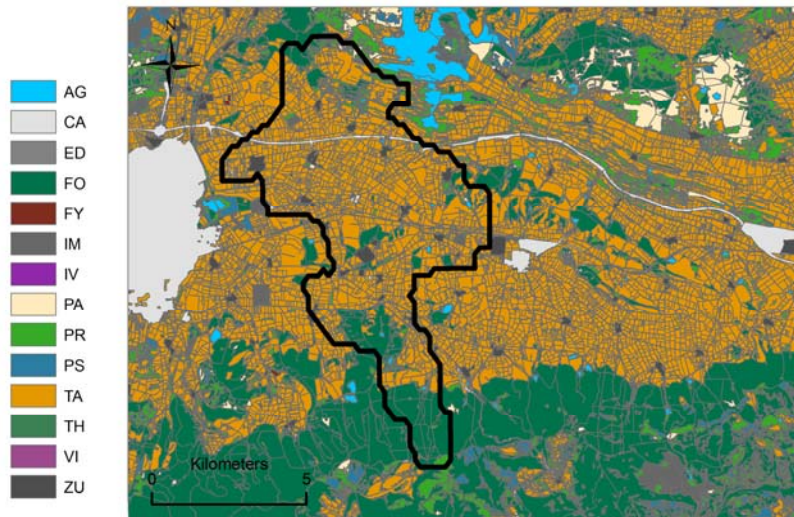


Figura 2-8. Distribución de los usos del suelo durante el año 2008.

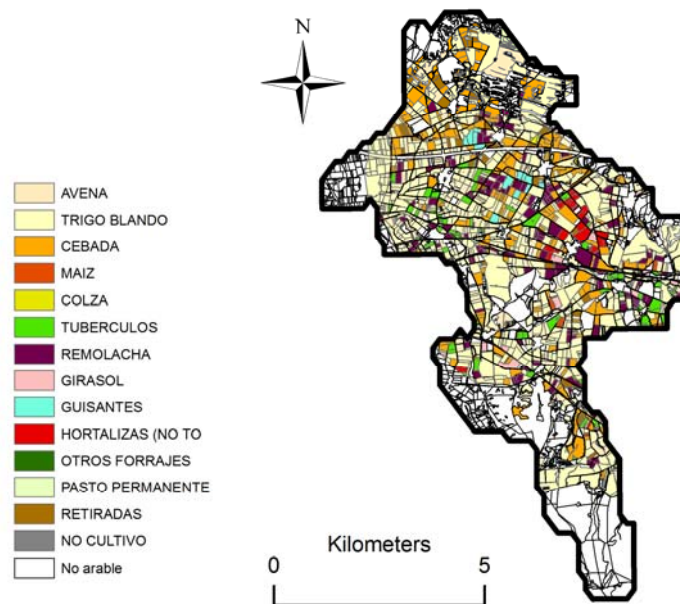


Figura 2-9. Ocupación agrícola en la zona de estudio durante el año 2008.

Descripción	Extensión (Km ²)	% respecto a tierra arable
Trigo blando	17	55
Cebada	5	17
Remolacha	3	9
Avena	2	7
Tubérculos	1	4
Retirada	1	3
Hortalizas	1	2
Girasol	0	1
Guisantes	0	1
No arable	22	-
	53.9	100

Tabla 2-3. Extensión de la ocupación agrícola en la zona de estudio durante el año 2008.

2.1.4. Actividad agrícola

La práctica más común en la Llanada Alavesa consta de la rotación de cultivos, en la que se alternan cultivos de secano y de regadío. Aún así, con el notable crecimiento de las parcelas de secano, especialmente durante la última década, la rotación entre diferentes cereales también se está popularizando.

En cuanto a la **fertilización** se refiere, el hecho de que exista una gran similitud entre los principales cultivos, trae consigo que tanto el tipo de fertilizante empleado como las dosis y periodos de abonado, sean bastante similares. La fertilización suele ser fraccionada, por lo que cada cultivo recibe distintas dosis (generalmente dos, correspondiendo al abonado de fondo y al de cobertera) en las que se aplican dos tipos de fertilizante. El abonado de fondo suele ser de tipo N-P-K, el cual se aplica antes o durante la siembra y proporciona el nitrógeno, fósforo y potasio necesarios durante el primer estadio de crecimiento. El abonado de cobertera es, por lo general, nitrogenado (habitualmente Nac 27%) y es necesario para suplir las necesidades del cultivo hasta que éste es cosechado. En las Figuras 2-10 y 2-11 se muestran los itinerarios técnicos más comunes y la fertilización de cada tipo de cultivo (tanto la recomendada por el código de buenas prácticas agrarias como la aplicada habitualmente), respectivamente.

En cuanto al **riego** se refiere, únicamente se aplica durante los meses de estiaje, que dependiendo del agricultor y las condiciones meteorológicas de un determinado año, suele distribuirse en torno a 10 días (comunicación personal). Las prácticas de riego han cambiado considerablemente durante los últimos años. Mientras que hasta últimos de los 90 el agua empleada para riego era bombeada directamente del propio acuífero, posteriormente, debido a la legislación medioambiental y declaración de la Zona Vulnerable, se construyeron en las zonas de borde del acuífero balsas de recogida de agua superficial procedente de los pequeños arroyos de las laderas, que pudiesen abastecer la demanda de los cultivos de regadío. Este cambio se realizó para evitar la recirculación de nitrógeno en el agua de regadío (Arrate et al., 1992).

CULTIVOS		TIPO SUELO	FERTILIZACIÓN NITROGENADA RECOMENDADA (CÓDIGO DE BUENAS PRÁCTICAS AGRARIAS)		PRÁCTICAS HABITUALES DE FERTILIZACIÓN	
			FONDO U.F.N	COBERTERA U.F.N	FONDO U.F.N	COBERTERA U.F.N
TRIGO	Cereal	Fértil	Eliminar	125	40-50 (Oct.-Nov.-Dic)	130-150 (en ahijado)
		Pobre	30	150-175		
	Leguminosa	Fértil	Eliminar	100	Dosis anterior rebajada en 10-25%	
		Pobre	30	150		
	Patata	Fértil	Eliminar	100-125	0-40 *	120-140 *
		Pobre	30	150		
Remolacha	Fértil	Eliminar	125			
	Pobre	30	150			
CEBADA		Fértil	30-40	50	30-40	100-120 (ahijado)
		Pobre	30-40	75		
GIRASOL			20-40	NO REALIZAR	20-40	
GUISANTE PROTEAGINOSO			20-40	NO REALIZAR	20-40	
MAIZ FORRAJERO			100-125	100-125	70-100	140-180
PATATA CONSUMO			Dosis total: 150-200 (20% en Abri.-May.)	1ª 30%tot. (Jun.-Jul.) 2ª 50%tot. (Jul.-Ago.)	70-90	100-140
PATATA SIEMBRA			90-100	60-80	150-200	0-75
REMOLACHA			1/3 de dosis total (120-180)	2/3 de dosis total (120-180)	90-100 *	100-120 *
JUDÍA VERDE			40-50 (May.-Jun.)	NO NECESITA	40-50	NO HAY
COLZA			30 (Sept.)	1ª 60-80 (arranque veget.) 2ª 60-80 (20 días después)	Similar al trigo	Similar al trigo
VIÑAS			Con estiércol: 10.000 Kh/Ha y año estiércol: 50 UFN abono químico	Sin	30-50	

Figura 2-10. Fertilización nitrogenada recomendada según el código de buenas prácticas agrarias y habitual (Cerro, 2013).

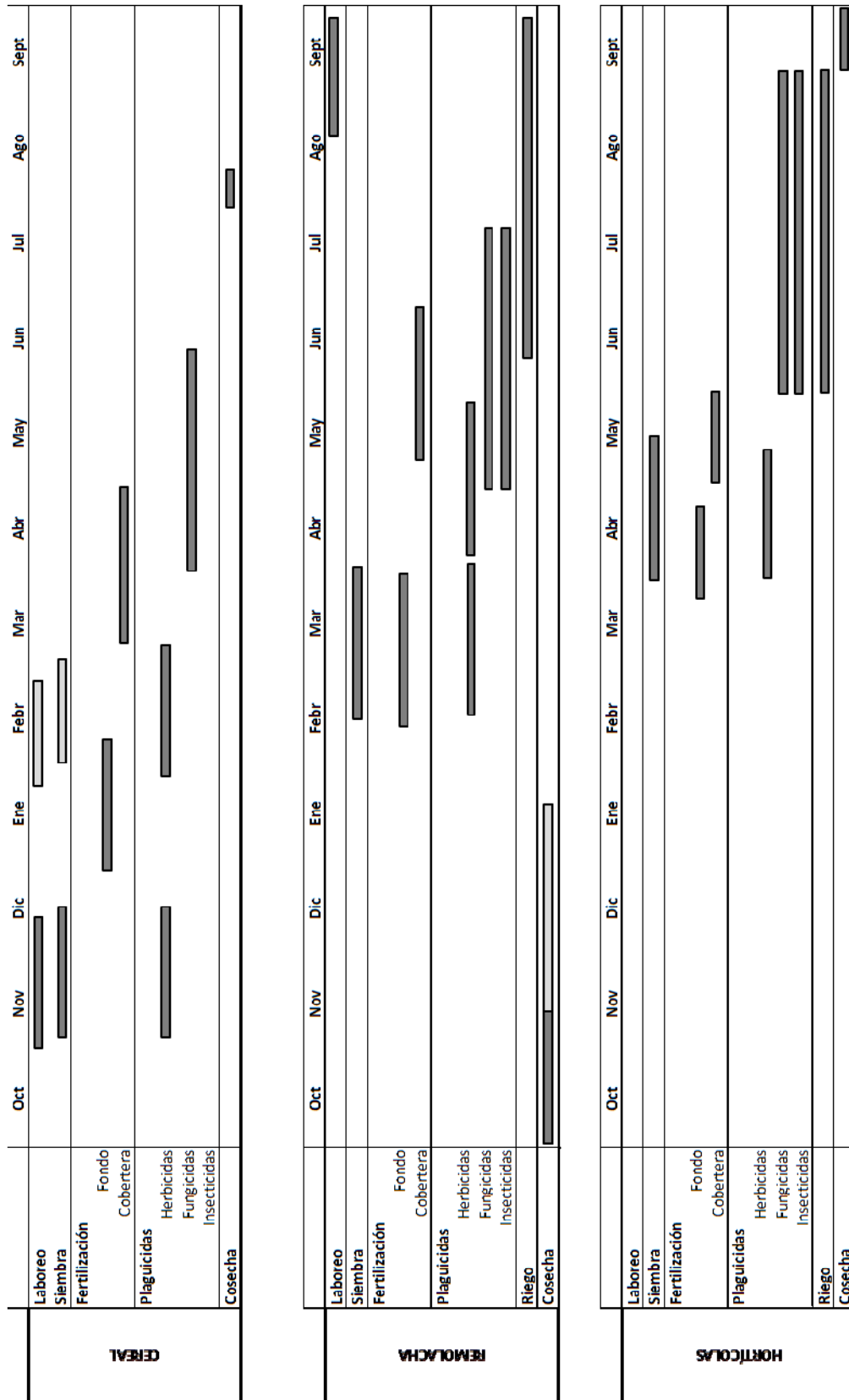


Figura 2-11. Itinerario técnico general del los principales cultivos de la zona de estudio (Cerro, 2013).

2.1.5. Problemática agrícola de la zona de estudio

El acuífero cuaternario de Vitoria-Gasteiz es un claro ejemplo de la degradación de la calidad de sus aguas subterráneas debido a la actividad agrícola (Arrate, 1994). El cambio de tipo de cultivo (concretamente a cultivos de regadío con la consecuente mayor demanda de agua para el regadío estival durante la década de los 80), el uso excesivo de fertilizantes, el notable incremento de la red de acequias de drenaje, la desviación de los cauces naturales y la recirculación de compuestos nitrogenados por retorno de riegos, se consideran haber sido factores de impacto sobre la contaminación de las aguas (Arrate, 1994; Sánchez-Pérez et al., 2003).

Las acciones mencionadas acarrearón un notable aumento de la concentración de nitratos en las aguas subterráneas, llegándose a superar en algunos puntos los 250 mg NO₃ l⁻¹ a principios de la década de los 90 (Arrate et al., 1997). Posteriormente, mediante la concienciación y, sobretodo, legislación y la evolución de los precios de los fertilizantes, se consiguió un menor uso de fertilizantes por parte de los agricultores, lo cual dio lugar a un descenso progresivo del nitrato en las aguas subterráneas. Hacia los últimos años de los 90 la concentración de nitratos se estabilizó en torno a los 50-70 mg NO₃ l⁻¹ lo cual se consideró que principalmente era debido a un uso más racional de los fertilizantes y al cambio en el origen del agua empleada para riego (Sánchez-Pérez, 2003).

El alto contenido de nitratos que presentan las aguas subterráneas es un problema que afecta a buena parte de los valles agrícolas europeos. Por este motivo, con el objetivo de mejorar esta situación, la Comisión de la Unión Europea aprobó en diciembre de 1991, la Directiva 91/676/CEE, la cual impone a los estados miembros de la Unión la obligación de identificar aquellas zonas en las que las aguas estén afectadas, o puedan llegar a estarlo, por la contaminación de nitratos de procedencia agrícola y declaradas como Zona Vulnerable. Asimismo, quedó establecido en 50 mg NO₃ l⁻¹ el límite de referencia para las aguas subterráneas. La Directiva también establecía la necesidad de elaborar códigos de buenas prácticas agrarias, los cuales no eran de obligado cumplimiento para los agricultores, programas de acción para las designadas zonas vulnerables y programas de control. Esta Directiva fue traspuesta al Estado español mediante el Decreto 261/1996.

Posteriormente, fue aprobado el Decreto 390/1998, en el que se declaró como Zona Vulnerable al Sector Oriental de la Unidad Hidrogeológica de Vitoria-Gasteiz. En el mismo Decreto se aprobó el Código de Buenas Prácticas Agrarias de la Comunidad Autónoma del País Vasco y los Planes de actuación sobre las Zonas Vulnerables.

En diciembre del 2000, mediante la Orden de 18 de diciembre de 2000, el Gobierno Vasco publicó el Plan de Actuación de las Zonas Vulnerables, de obligado cumplimiento en las zonas así declaradas, en el que establecía medidas de control y seguimiento de la evolución temporal de nitratos.

Posteriormente, en el año 2008, se procedió a la ampliación de la Zona Vulnerable a su sector Dulantzi mediante la Orden de 8 de abril de 2008 y en el año 2009, algunas zonas del Sector Occidental mediante la Orden de 18 de noviembre de 2009.

Así, el Gobierno Vasco lleva un seguimiento de las Zonas Vulnerables del Acuífero Cuaternario desde el año 1998 mediante Telur, elemento integrante de la infraestructura Hidrometeorológica de la CAPV (www.telur.es/redbas/).

2.2. TRATAMIENTO DE DATOS

En trabajos de modelización, la preparación de los datos de campo suele ser una tarea necesaria y de gran importancia tanto para preparar las **variables de entrada** de los modelos así como para llevar a cabo las **etapas de calibración y validación**. A continuación, se describe el tratamiento realizado en cuanto a los datos climatológicos se refiere, a los de calidad y a las transformaciones realizadas.

2.2.1. Datos climatológicos

Como se ha mencionado en el apartado 2.1.1.1. *Localización* (Figura 2-1), en las inmediaciones de la cuenca del río Alegria existen actualmente cuatro estaciones meteorológicas. No obstante, el año de implementación de las mismas mostrado en la Tabla 2-4, así como otras características específicas, difiere significativamente.

Nombre	Organismo	Longitud UTM	Latitud UTM	Altitud (m)	Año de implementación
Foronda	AEMET	521780	4746629	513	1977
Arkaute-C001	Euskalmet	530608	4744631	517	2002
Alegria-C056	Euskalmet	538992	4743676	545	2002
Kapildui-C047	Euskalmet	537916	4735162	1173	2002

Tabla 2-4. Características de las estaciones meteorológicas.

El hecho de que para llevar a cabo este estudio fuesen necesarios los datos meteorológicos desde el año 1986 y que éstos sólo estuviesen disponibles en la estación de Foronda, estación más alejada de la zona de estudio, hizo que se replanteasen los datos que iban a ser empleados como dato de entrada. Así, para evitar cambiar la procedencia de los datos a mitad de simulación, algo que además no es posible en el modelo SWAT, se estudiaron las relaciones entre los datos de las distintas estaciones para establecer un criterio de conversión con el que obtener series continuas para todo el periodo de simulación.

De esta forma, se optó por emplear los datos de las tres estaciones más cercanas de la zona de estudio, por lo que los datos que se necesitó convertir fueron aquellos registrados en Foronda y correspondientes a la precipitación y temperatura del periodo 1986-2001.

Para llevar a cabo esta conversión, primero, se verificó si los datos de cada estación (Arkaute, Alegria y Kapildui) mantienen una relación temporal significativa con respecto a la estación de Foronda, indicativa de que no se han dado grandes cambios en las estaciones durante los años estudiados, lo cual debe asumirse también para los años anteriores. Esto puede comprobarse mediante el coeficiente de determinación de la precipitación acumulada de cada estación a estudio, el cual en los tres casos es superior a 0.99, por lo que se considera que las relaciones son significativas. A continuación, se procede a la realización de los gráficos de

dispersión en los que se representan los datos diarios de Foronda con los datos del resto de las estaciones y se obtienen las ecuaciones que relacionan los valores de una estación con sus equivalentes, obteniendo así las ecuaciones de conversión de la precipitación (Figura 2-12, Tabla 2-5) y de la temperatura máxima y mínima (Figura 2-13, Tabla 2-5).

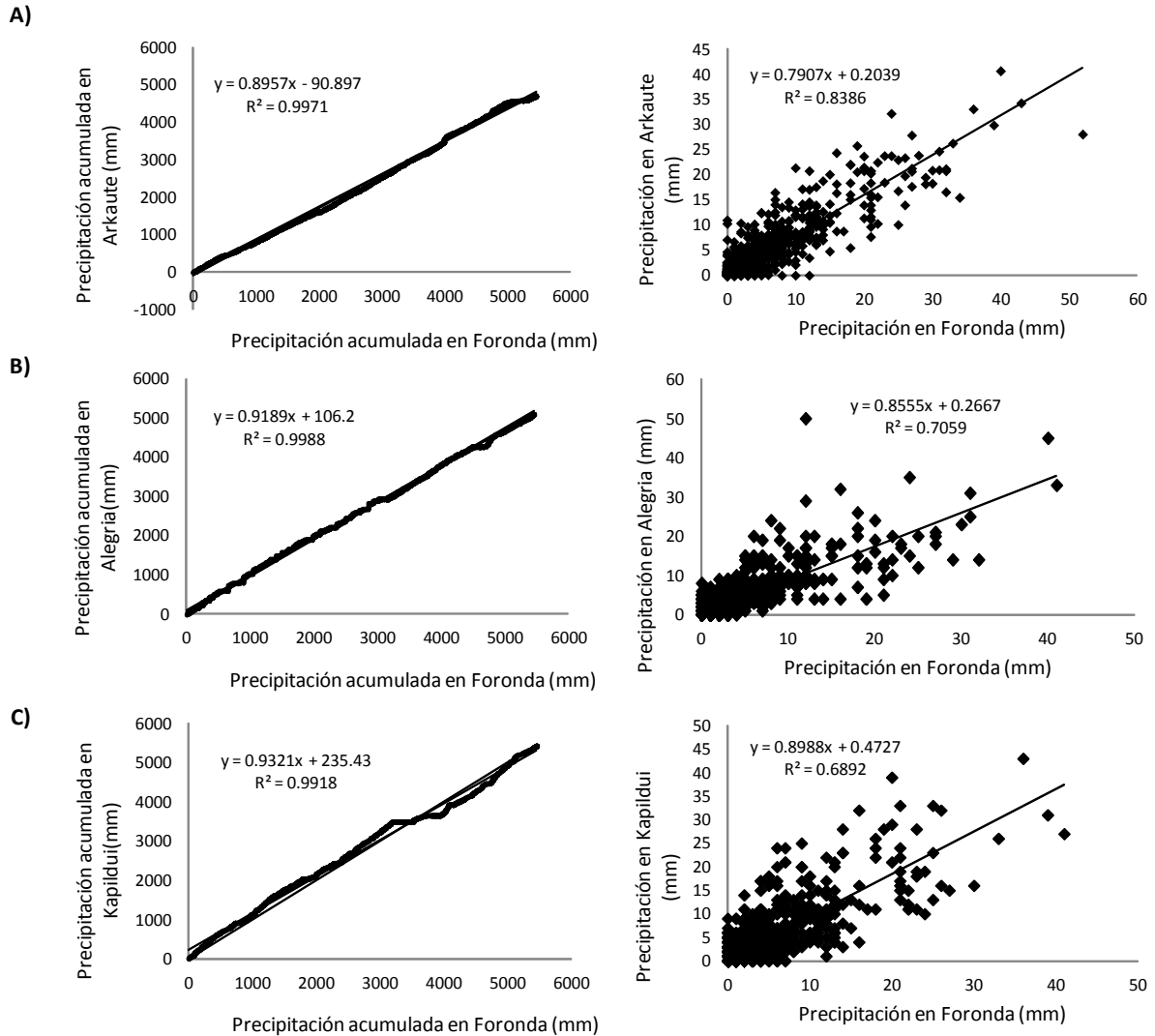


Figura 2-12. Relación temporal entre los datos de precipitación de las estaciones y dispersión entre los datos de las estaciones de A) Arkaute, B) Alegria y C) Kapildui con respecto a los datos de la estación de Foronda.

	Foronda-Arkaute	Foronda-Alegria	Foronda-Kapildui
Precipitación	$y=0.7907x+0.2039$	$y=0.8555x+0.2667$	$y=0.8988x+0.4727$
Temperatura máx.	$y=0.9932x-0.5129$	$y=0.9963x-1.154$	$y=1.0024x-5.2356$
Temperatura mín.	$y=0.9566x+0.1214$	$y=0.9732x+0.1805$	$y=0.8051x-0.1238$

Tabla 2-5. Ecuaciones empleadas para la conversión de datos.

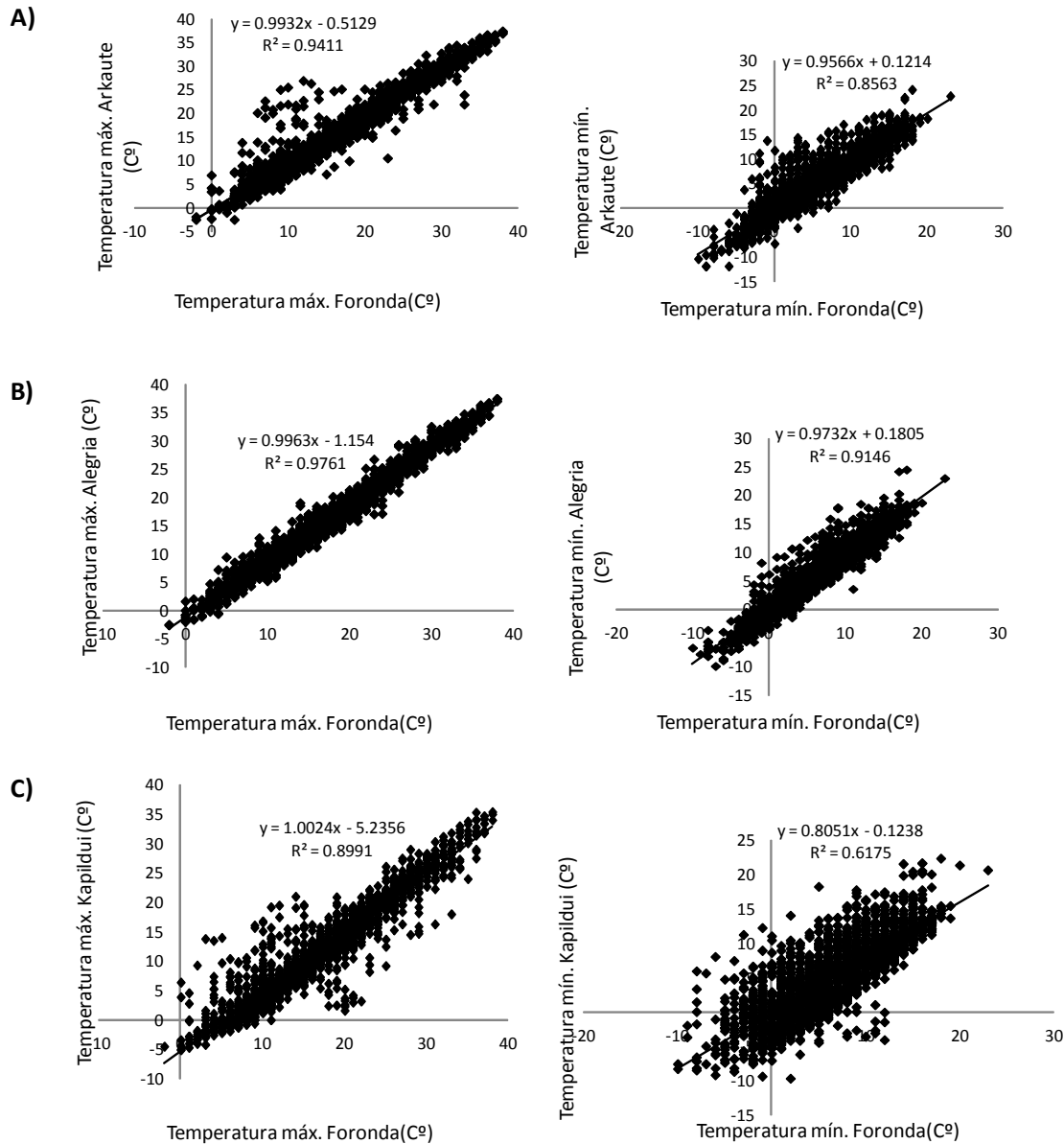


Figura 2-13. Dispersión entre los datos de temperatura máxima y mínima de las estaciones de A) Arkaute, B) Alegria y C) Kapildui con respecto a los datos de la estación de Foronda.

2.2.2. Datos de calidad

Hay varias consideraciones que deben tenerse en cuenta en estudios de modelización como este. Por un lado, hay que tener en cuenta que para los procesos de calibración y validación de un modelo, los datos de campo son completamente necesarios y que al tratarse de una modelización de un periodo tan largo (1986-2011), lo más habitual es tener que recurrir a datos obtenidos de diversas fuentes. Esto significa, que en el caso de que existan datos de campo, pueden no corresponder a una misma localización, tal y como acontece en el presente estudio. Efectivamente, el muestreo de agua realizado por Arrate (1997) fue llevado a cabo en Eskalmendi (Muestreo punto A de la Figura 2-1) y a pesar de que Martínez (2004) muestreó

aguas tanto en Arkaute (Muestreo punto B de la Figura 2-1) como en Eskalmendi, debido a la puntualidad de estos datos con respecto a los medidos por Cerro (2013) en Arkaute, se optó por emplear los datos de esta última localización.

Se contó con un total de 49 datos de concentración de nitrato en el río Alegria durante el periodo 11/27/1990-06/29/1994, 69 durante el periodo 01/02/2001-12/22/2005 y 101 durante el periodo 10/28/2009-12/09/2011 y, para que los datos del periodo más antiguo (los obtenidos por Arrate, 1994), pudiesen ser empleados, se tuvieron que convertir mediante técnicas de correlación.

Para obtener la ecuación de conversión se emplearon los datos de las campañas realizadas por Martínez (2007) ya que contemplaba datos de concentración tanto en Arkaute como en Eskalmendi. Se observó que en su gran mayoría, las muestras de agua en Arkaute presentan mayor concentración que las de Eskalmendi, lo que ha sido atribuido al aporte de agua de menor concentración de nitrato proveniente de la zona de Salburua y los arroyos de Santo Tomas y Errekaleor tras pasar la zona de Arkaute. Precisamente, esta diferencia de concentración es mayor durante los meses de estiaje, cuando, como fue descrito por Arrate (1997), los cauces del río quedan cubiertos por vegetación que absorbe gran parte de nitrógeno disuelto, provocando así, una disminución en la concentración a lo largo del río Alegria.

Con el objetivo de intentar aislar las diferencias de concentración entre los dos puntos debidas al aporte de aguas de menor concentración y a las diferencias provocadas por la absorción de la vegetación, se consideró la necesidad de descartar las concentraciones más bajas en Eskalmendi, que acontecían en época de estiaje.

Tras estudiar la dispersión de los datos, una vez descartados los valores de concentración más bajos en Eskalmendi, se observó que la mejor correlación se obtenía tras ignorar los valores inferiores a 10 mg N-NO₃ l⁻¹ (Figura 2-14). El coeficiente de determinación mostraba un valor de 0.50 y la ecuación con la que se convirtieron los datos de Eskalmendi fue la Ecuación 2-1.

$$(N-NO_3)_{Arkaute} = 0.5762 * (N-NO_3)_{Eskalmendi} + 26.316 \quad (2-1)$$

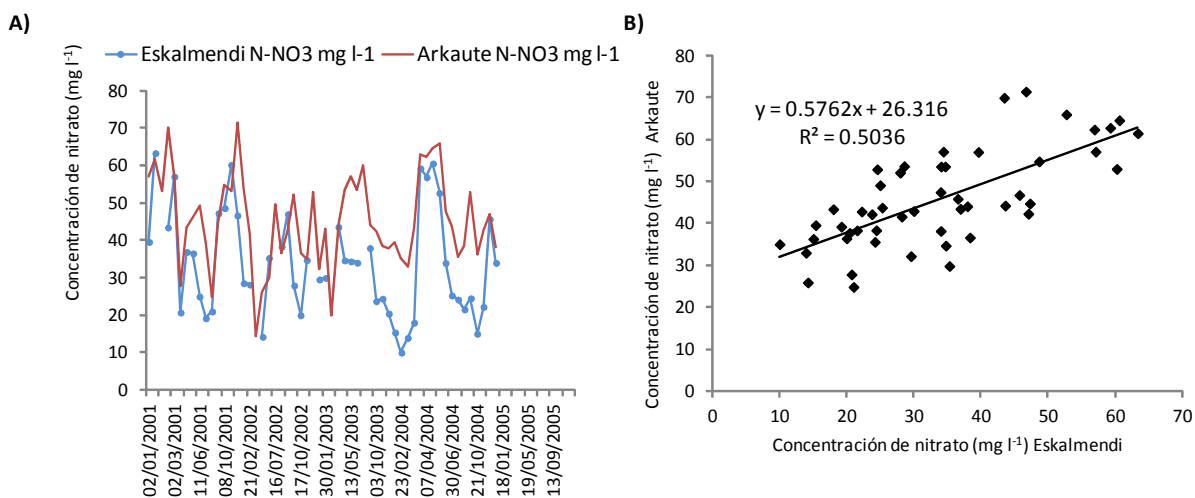


Figura 2-14. A) Datos empleados para la conversión; B) Dispersión de los datos y ecuación empleada.

2.2.3. Cálculos de carga mediante Load Estimator

Con el objetivo de convertir los datos puntuales de concentración de NO_3 (mg l^{-1}) en series continuas de carga exportada de NO_3 (kg día^{-1}), se empleó el programa Load Estimator, LOADEST (Runkel et al., 2004), el cual pondera los datos de la concentración al caudal respectivo e interpola los datos de una forma lineal mediante diferentes modelos de regresión. En principio, el modelo que aporta la mínima varianza es considerado el mejor, y si es verificada una distribución normal de los datos estimados, la ecuación que suele ser empleada es la AMLE (Adjusted Maximum Likelihood Estimation).

Este proceso se estima necesario al trabajar con códigos como el SWAT, los cuales simulan una exportación de carga continua que necesariamente debe ser comparada con datos observados de este tipo. Por lo tanto, hay que considerar que los datos empleados como observados, en el caso de la carga de N, son en realidad, datos convertidos a través de este programa.

2.3. NUMERICAL MODELING

2.3.1. Description of the codes

2.3.1.1. SOIL AND WATER ASSESSMENT TOOL (SWAT)

The SWAT code (Arnold et al., 1998) creates agro-hydrological semi-distributed models which perform continuous simulations. It is a conceptual code that was developed by the United States Department of Agriculture (USDA). It was created by the combination of the following codes: CREAMS (Chemicals, Runoff and Erosion Agricultural Management Systems; Knise, 1980), GLEAMS (Groundwater Loading Effects on Agricultural Management Systems; Leonard et al., 1987) and EPIC (Environmental Impact Policy Climate; Izaurralde et al., 2006, called on its original version: Erosion Productivity Impact Calculator; Williams et al., 1990).

The SWAT code was at first established for a daily time step, but since the sub-daily option was incorporated (Van Griensven and Bauwens, 2005; Debele et al., 2008), different studies have employed this temporal discretization in order to study processes that can't be contemplated in a daily basis (Jeong et al., 2011; Maharjan et al., 2013).

With regard to its spatial discretization, the code divides each basin into subbasins and these into Hydrologic Response Units (HRU), which are created by the combination of soil, slope and land use maps, and so, are thought to have a similar hydrological behavior. Each HRU is considered by the code as a subbasin fraction which does not have a specific location but is characterized by the distance to the outlet of the subbasin which it belongs to. Once the water or nutrients reach the outlet of a subbasin they are routed through the channels to the outlet of the watershed without any possible interaction with the soils or the aquifer (Figure 2-15). Although there is a detailed user guide (Neitsch et al., 2009) comprising all the processes considered by the code, it was estimated necessary to describe here the most relevant processes regarding the current Thesis work.

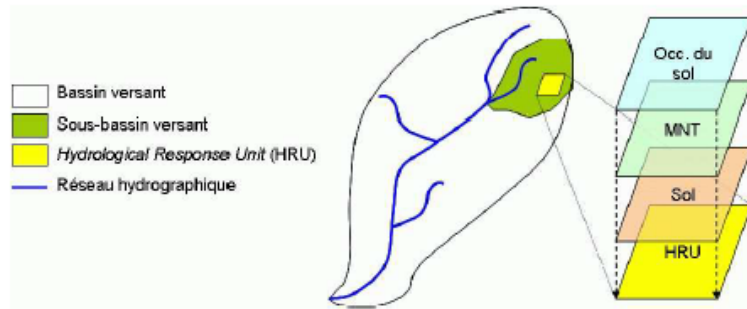


Figure 2-15. Representation of the spatial distribution of the SWAT model (Boithias, 2012).

Water Flow

The SWAT code divides the hydrological processes' simulation into two differentiated phases. First, the code calculates every process affecting the water balance at HRU level just until the water is discharged into the channels. Then, the code calculates the water routing through the channels until it reaches the main outlet.

SWAT is able of simulating most of the hydrological processes occurring within a watershed (precipitation in form of rain or snow, snow melting, infiltration, superficial flow, lateral flow, groundwater flow, channel routing, percolation to shallow or deep aquifers and water pumping) based on empirical parameters that represent the physical processes. In the Figure 2-16 there are represented these processes and the different water reservoirs considered in the model. In the Table 2-6 there are represented the algorithms used for the processes' simulation.

Hydrological process	Algorithms
Surface Runoff	SCS Curve Number; Green-Ampt infiltration method
Channel routing	Variable Storage Method; Muskingum Method
Percolation	Storage Routing Method
Groundwater flow	Recesion Constant for Base Flow; Aquifer Storage; Re-evaporation
Evapotranspiration	Penman-Monteith; Hargreaves; Priestley-Taylor

Table 2-6. Algorithms used by the SWAT code (Neitsch et al., 2009).

The water that reaches an HRU by precipitation or irrigation can leave the HRU by runoff or infiltration as well as evapotranspiration. SWAT allows simulating the **infiltration-surface runoff** ratio by two different methods: The Curve Number (SCS, 1972) or the Green-Ampt infiltration method (1911). The Curve Number is the most usual method and it calculates the generated runoff volume (Q_{surf}) for a given precipitation event (Equation 2-2). For this calculus the formulation requires an empiric parameter (CN) and it assumes that the initial abstractions are approximately two times the value of S, parameter that is directly related to the CN according to the Equation 2-3.

$$Q_{surf} = \frac{(P-0.2S)^2}{(P+0.8S)} \quad (2-2)$$

$$S = 25.4 \left(\frac{1000}{CN} - 10 \right) \quad (2-3)$$

Where:

Q_{surf} is the surface runoff volume (mm),

P is the precipitation (mm),

S is a retention parameter (-),

CN is the curve number (-).

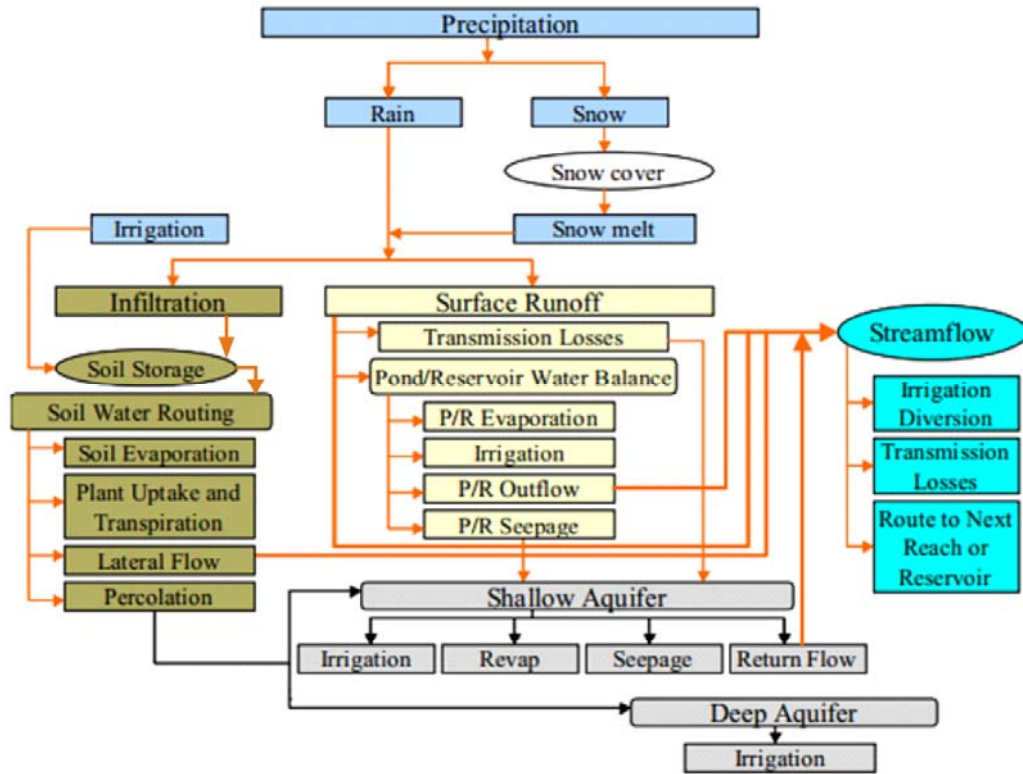


Figure 2-16. Hydrological processes considered by SWAT (www.epa.ohio.gov).

The empiric parameter CN depends on the soil hydrological group (which are distinguished according to the runoff generation potential), antecedent soil water conditions, a retention parameter and the slope adjustment. SWAT updates its value at a daily basis considering the mentioned aspects and so, the value changes both spatial and temporarily. Common values can be found in the literature (SCS, 1972).

Once the runoff volume generated by each HRU has been calculated, it is obtained the time needed for it arrives at the subbasin outlet according to the concentration time, which depends on the distance between the HRU and the channel, and the flow velocity calculated with the Manning's Equation (Equation 2-4).

$$v = \frac{q_{ov}^{0.4} * s^{0.3}}{n^{0.6}} \quad (2-4)$$

Where:

v is the surface runoff flow velocity ($m s^{-1}$),

q_{ov} is the average surface runoff flow rate ($m^3 s^{-1}$), its value is assumed to be $6.35 mm h^{-1}$,

s is the average slope of the sub-basin ($m m^{-1}$),

n is the Manning's roughness coefficient of the subbasin (-).

After the surface runoff concentration time has been calculated, it is obtained similarly the concentration time of the channels. This also depends on the distance, slope, flow velocity calculated by Manning's equation and some assumptions that can be consulted on Neitsch et al., (2009).

The SWAT code, once the concentration times are known, calculates the peak flow rate in every subbasin outlet according to the modified rational formula (Equation 2-5). This peak flow depends on the fraction of precipitation that occurs during the time of concentration, the surface runoff volume, the sub-basin area and its time of concentration.

$$Q_{max} = \frac{\alpha_{tc} * Q_{surf} * A}{3.6 * t_{conc}} \quad (2-5)$$

Where:

Q_{max} is the peak flow rate ($m^3 s^{-1}$),

α_{tc} is the fraction of the precipitation that occurs during the time of concentration (-),

Q_{surf} is the surface runoff volume (mm),

A is the extensión of the sub-basin (km^2),

t_{conc} is the time of concentration (h).

SWAT allows lowering the value of the peak flow rate by a delay parameter called SURLAG. By this parameter it can be controlled for a given concentration time the water amount reaching the channels. The higher its value, the higher fraction of water reaches the channels.

The fraction of the precipitation that is not transformed into the surface runoff is infiltrated to the soils and contributes to the soil water reservoir. Thus, the soil water responds to the water balance defined by the Equation 2-6.

$$SW_t = SW_0 + \sum_{i=1}^t (P - Q_{surf} - Q_{lat} - Q_{perc} - ET) \quad (2-6)$$

Where:

SW_t is the soil water on day t (mm),

SW_0 is the soil water on previous day (mm),

P is the precipitation (mm),

Q_{surf} is the surface runoff (mm),

Q_{lat} is the lateral runoff (mm),

Q_{perc} is the percolation into aquifers (mm),

ET is the evapotranspiration (mm).

The soil is divided into several layers and the water retained on it can move downwards if the water content of a layer exceeds the field capacity (FC) and the underlying layer is not saturated. This process is known as **percolation** and it occurs when the underlying layer's hydraulic conductivity is not lower than that of the overlying one. The amount of water that moves from one layer to the underlying layer is calculated using storage routing methodology that depends on the amount of water that exceeds the FC and the travel time for percolation defined by the Equation 2-7.

$$TT_{perc} = \frac{SAT-FC}{K_s} \quad (2-7)$$

Where:

TT_{perc} is the travel time for percolation (h),

SAT is the amount of water in the soil layer when completely saturated (mm),

FC is the water content at field capacity (mm),

K_s is the saturated hydraulic conductivity (mm h^{-1}).

The amount of water when the soil is completely saturated (SAT) is for simplicity a conversion from the **soil porosity**, expressed as a fraction of the total soil volume. It is not a parameter for the model, as it calculates it depending on the bulk density, ρ , (Mg m^{-3}) and the particle density which based on research is assumed to be 2.65 Mg m^{-3} (Equation 2-8).

$$\text{SAT} \approx \phi = 1 - \frac{\rho}{\rho_s} = 1 - \frac{\rho}{2.65} \quad (2-8)$$

Where:

SAT is the amount of water in the soil layer when completely saturated (mm),

ϕ is the soil porosity ($\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3}$),

ρ is the bulk density (Mg m^{-3}) calculated as the solid mass divided by the total volume,

ρ_s is the particle density (Mg m^{-3}).

On the other hand, field capacity (FC) is calculated by the model according to different parameters set by the user in agreement to the Equation 2-9.

$$\text{FC} = \text{WP} + \text{AWC} = 0.4 * \frac{m_c * \rho}{100} + \text{AWC} \quad (2-9)$$

Where:

FC is the water content at field capacity expressed as a fraction of the total soil volume (mm),

WP is the water content at wilting point expressed as a fraction of the total soil volume (mm),

AWC is the available water capacity of the soil expressed as a fraction of the total soil volume (mm),

m_c is the percent clay content of the layer (%),

ρ is the bulk density of the layer (Mg m^{-3}).

The **lateral flow** occurs when the underlying layers' hydraulic conductivity is lower than that of the overlaying ones. In those cases, lateral runoff is calculated according to a cinematic approach. Similarly to the delay established for surface runoff, for lateral runoff can also be set a delay controlling the fraction of the water volume held in soils. This process is simulated by the LAT_TTIME parameter. The higher its value, the lower fraction of water reaches the channels.

With regard to the **evapotranspiration** process, SWAT gives the possibility of selecting a method between different possibilities. Thus, it can be chosen between Penman-Monteith method (Equation 2-10), Priestley-Taylor method or Hargreaves method (Equation 2-11).

$$ET_0 = \left[\frac{\Delta(H_{net} - G) + \rho_{air} * c_p * [e_z^0 - e_z] / r_a}{\Delta + \gamma * (1 + r_c / r_a)} \right] / \lambda \quad (2-10)$$

Where:

ET_0 is the reference evapotranspiration rate (mm d^{-1}),

Δ is the slope of the saturation vapor pressure-temperature curve ($\text{kPa } ^\circ\text{C}^{-1}$),

H_{net} is the net radiation ($\text{MJ m}^{-2} \text{ d}^{-1}$),

G is the heat flux density to the ground ($\text{MJ m}^{-2} \text{d}^{-1}$),
 ρ_{air} is the air density (kg m^{-3}),
 c_p is the specific heat at constant pressure ($\text{MJ kg}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$),
 e_z^0 is the saturation vapor pressure of air at height z (kPa),
 e_z is the water vapor pressure of air at height z (kPa),
 γ is the psychrometric constant ($\text{kPa } ^\circ\text{C}^{-1}$),
 r_c is the plant canopy resistance (s m^{-1}),
 r_a is the diffusion resistance of the air layer (s m^{-1}),
 λ is the latent heat flux density ($\text{MJ m}^{-2} \text{d}^{-1}$).

$$ET_0 = \frac{0.0023 * H_0 (T_{\text{max}} - T_{\text{min}})^{0.5} (T_{\text{med}} + 17.8)}{\lambda} \quad (2-11)$$

Where:

ET_0 is the reference evapotranspiration (mm d^{-1}),
 H_0 is the extraterrestrial radiation ($\text{MJ m}^{-2} \text{d}^{-1}$),
 T_{max} is the maximum air temperature ($^\circ\text{C}$),
 T_{min} is the minimum air temperature ($^\circ\text{C}$),
 T_{med} is the mean air temperature ($^\circ\text{C}$),
 λ is the latent heat of evapotranspiration (MJ kg^{-1}).

Once the model has calculated the amount of reference evapotranspiration (ET_0) it needs to divide this water demand into **potential transpiration** (T_p) and **potential evaporation** (E_p). The former is estimated based on the Leaf Area Index (LAI) and the latter is based on the depth of the soil layers and the maximum evaporative amount depending on meteorological conditions.

When the potential values are calculated, the model proceeds to calculate the actual values. Thus, the actual **transpiration** is obtained by a relationship between crop growth stage (LAI) and water requirements, and the actual water content in soil. The model assumes that due to a higher content of roots in the surface layers, the transpiration occurring in these layers is higher, and so it uses an exponential function for potential water demand distribution. It can occur that the upper layers do not have enough water to satisfy this distributed demand. To avoid this situation a parameter called EPCO was incorporated to the code, which modifies the water distribution and allows the lower layers meeting the demand not satisfied by the upper ones.

After recalculating the redistributed potential water uptake by plants, in order to consider the effect of low water content, which supposes the water to be more tightly hold by the soil particles, the code incorporates an exponential function that carries the uptake to be lower when the depth increases.

In the last step, the model checks the water content in each soil layer and simulates the water uptake. This being, as maximum, the difference between soil water content and the amount of water at wilting point conditions.

Similarly, the **evaporation** is distributed exponentially in such a way that the 50% of the evaporative demand (potential evaporation) is met in the top 10 mm of soil. As it happens with

the transpiration, it may occur that the topmost layers do not have enough water to demand the evaporation water volume and so, a compensation parameter called ESCO was introduced in the code. For the simulation of the evaporation process it is also incorporated an exponential function to consider a lower evaporation from deeper layers and, in addition, the code establishes a maximum amount that can be evaporated at any time. This amount corresponds to the 80% of the plant available water which is, in fact, the difference between the soil water content and the WP.

When the water leaves the deepest soil layer by percolation, it can **recharge** the shallow and deep aquifers according to a fraction established by the user. The recharge formulation is based on an exponential function proposed by Sangrey et al., (1984), and depends on the soil water retention capacity, the antecedent conditions and a parameter called GW_DELAY (Equation 2-12). This equation simulates the time delay since the water exits the soil profile until it recharges the aquifers.

$$w_{\text{rchrg},i} = \left(1 - \exp \left[\frac{-1}{\text{GW_DELAY}} \right] * w_{\text{seep}} + \exp \left[\frac{-1}{\text{GW_DELAY}} \right] \right) * w_{\text{rchrg},i-1} \quad (2-12)$$

Where:

$w_{\text{rchrg},i}$ is the amount of recharge entering the aquifers on day i (mm),

GW_DELAY is the delay time of the overlying geologic formations (d),

w_{seep} is the percolation from the deepest layer, that is the total amount of water exiting the bottom of the soil profile on day i (mm),

$w_{\text{rchrg},i-1}$ is the amount of recharge entering the aquifers on day $i-1$ (mm).

Whereas the water that enters the deep aquifer is lost from the system, the water entering the shallow aquifer can leave by several pathways. On the one hand, it can move upwards from the shallow aquifer into overlying unsaturated soil layers. This process, known as **revap**, was incorporated to simulate the water raising that occurs when evaporation takes the water out the upper layers and the water below raises by capillarity. It is significant in watersheds where the saturated zone is not very far below the surface or where deep-rooted plants are growing. It only occurs when the water stored in the shallow aquifer exceeds the threshold specified by the REVAPMN parameter.

On the other hand, the shallow aquifer can contribute to the base flow of the rivers based on a baseflow recession constant, expressed by the ALPHA_BF parameter, according to the Equation 2-13. This parameter is a direct index of groundwater flow response to changes in recharge (Smedema y Rycroft, 1983). The flow only occurs when the shallow aquifer storage (mm) is higher than the value established by the parameter GWQMN, parameter that determines the threshold water level in the shallow aquifer for groundwater contribution to the main channel to occur.

$$Q_{\text{gw},i} = Q_{\text{gw},i-1} * \exp(-\text{ALPHA_BF} * \Delta t) + w_{\text{rchrg},\text{sh}} * (1 - \exp[-\text{ALPHA_BF} * \Delta t]) \quad (2-13)$$

Where:

$Q_{\text{gw},i}$ is the groundwater flow into the main channel on day i (mm),

$Q_{\text{gw},i-1}$ is the groundwater flow into the main channel on day $i-1$ (mm),

ALPHA_BF is the baseflow recession constant (-),

Δt is the time step (d),

$W_{\text{rchrg,sh}}$ is the amount of recharge entering the shallow aquifer on day i (mm).

As it can be appreciated, the groundwater flow is simulated by the interaction of these processes based on different parameters, without the existence of a typical groundwater flow equation (Macalister, 2010).

Similarly to the soil water balance, a balance for the shallow aquifer can be written by the Equation 2-14.

$$aq_{\text{sh},i} = aq_{\text{sh},i-1} + Q_{\text{perc}} - Q_{\text{gw}} - Q_{\text{revap}} - Q_{\text{pump}} - Q_{\text{dp}} \quad (2-14)$$

Where:

$aq_{\text{sh},i}$ is the water volume on the shallow aquifer on day i (mm),

$aq_{\text{sh},i-1}$ is the water volume on the shallow aquifer on day $i-1$ (mm),

Q_{perc} is the water percolated from the soil (mm),

Q_{gw} is the water lost to the channels (mm),

Q_{revap} is the water lost by the revap process (mm),

Q_{pump} is the water lost by pumping (mm),

Q_{dp} is the water lost to the deep aquifer (mm).

Nitrogen Transport

SWAT carries out every calculation of nutrient transport in a mass basis. Indeed, the nutrient movement by the groundwater is disconnected from the flow itself, so although the groundwater flow (mm) impacts on the quantity of nutrient movement (kg ha^{-1}), this is not simulated as a dissolved property that moves according to the flow.

For that purpose, the model converts the initial level of nitrate established for the soils in terms of concentration (mg N l^{-1}) into mass terms (kg N ha^{-1}) according to the bulk density (Mg m^{-3}) and soil thicknesses (mm). In the case of the aquifer, the N levels are directly input in terms of mass.

Thus, the soil N can be transported by several pathways. It can be lost from the soils by surface runoff (dissolved or particulate), lateral runoff or groundwater flow. The N transport through the topmost 10 mm of the soil, by both **surface runoff** and **lateral flow** if it occurs within the **topmost 10 mm**, is governed by the water flow and it can be limited by the parameter NPERCO according to the Equation 2-15.

$$\text{Sur}_{\text{NO}_3} = \text{NPERCO} * \text{NO}_3' * Q_{\text{Sur}} \quad (2-15)$$

Where:

Sur_{NO_3} is the amount of N reaching the channels by surface runoff (kg N ha^{-1}),

NPERCO is the nitrate percolation coefficient (-),

NO_3' is the amount of N mobile in the surface water (kg N mm^{-1}),

Q_{Sur} is the water discharged to the channels by surface runoff (mm).

Similarly, the same equation is applied for the calculation of the N discharged to the channels by **lateral flow** when the contribution is produced within the topmost 10 mm of soil. **Below this depth**, the nitrate removed by lateral runoff is calculated by the Equation 2-16.

$$\text{Lat}_{\text{NO}_3} = \text{NO}_3' * Q_{\text{Lat}} \quad (2-16)$$

Where:

Lat_{NO_3} is the amount of N reaching the channels by lateral flow (kg N ha⁻¹),

NO_3' is the concentration of N mobile in the layer contributing to the lateral flow (kg N mm⁻¹),

Q_{Lat} is the water discharged to the channels by lateral flow (mm).

Likewise, the N transported towards the deeper soil layers by **percolation**, is also dependent on the N mobile and the percolated water amount, so the N transport simulated by this pathway could also be represented by a equation similar to Equation 2-16.

The concentration of N mobile mentioned above refers to the N that can be transported by the water, taking into account the negative adsorption that can exist between soil minerals and anions such as the nitrate (Neitsch et al., 2009). This process depends on the nitrate concentration in a given layer, the water content and the porosity fraction from which anions are excluded (Equation 2-17).

$$\text{NO}_3' = \frac{\text{NO}_3 * \left(1 - \exp\left[\frac{-w_{\text{mobile}}}{(1 - \text{ANION_EXCL}) * \text{SAT}}\right]\right)}{w_{\text{mobile}}} \quad (2-17)$$

Where:

NO_3' is the concentration of N mobile in the layer (kg N mm⁻¹),

NO_3 is the amount of nitrate in the layer (kg N ha⁻¹),

w_{mobile} is the amount of mobile water (amount of water lost by any pathway) in the layer (mm),

ANION_EXCL is the fraction of porosity from which anions are excluded (-),

SAT is the saturated water content of the soil layer (mm).

Once the N reaches the deepest soil layer it can contribute to the aquifers' **recharge**. In the same manner the water flow is characterized by the GW_DELAY parameter to simulate the time delay since it exits the soil profile until it recharges the aquifers, the movement of N is determined by the same parameter (Equation 2-18).

$$\text{NO}_3_{\text{rchrg},i} = \left(1 - \exp\left[\frac{-1}{\text{GW_DELAY}}\right]\right) * \text{NO}_3_{\text{perc}} + \exp\left[\frac{-1}{\text{GW_DELAY}}\right] * \text{NO}_3_{\text{rchrg},i-1} \quad (2-18)$$

Where:

$\text{NO}_3_{\text{rchrg},i}$ is the amount of N entering the aquifers on day i (kg N ha⁻¹),

GW_DELAY is the delay time of the overlying geologic formations (d),

$\text{NO}_3_{\text{perc}}$ is the total amount of nitrate exiting the bottom of the soil profile on day i (kg N ha⁻¹),

$\text{NO}_3_{\text{rchrg},i-1}$ is the amount of nitrate in recharge entering the aquifers on day i-1 (kg N ha⁻¹).

When the nitrate recharge is calculated, the N content in the shallow aquifer is updated and its transport towards the channels is obtained according to Equation 2-19. The discharge of N to the channels depends on the N content within the shallow aquifer and the fraction between groundwater pathway flow respect the total water volume.

$$GW_{NO_3} = (NO_{3sh,i-1} + NO_{3rchr,i}) * \frac{Q_{gw}}{aq_{sh,i} + Q_{gw} + W_{revap} + W_{rchr,dp}} \quad (2-19)$$

Where:

GW_{NO_3} is the amount of nitrate in groundwater flow from the shallow aquifer in day i ($kg\ N\ ha^{-1}$),

$NO_{3sh,i-1}$ is the amount of nitrate in the shallow aquifer at the end of day $i-1$ ($kg\ N\ ha^{-1}$),

$NO_{3rchr,i}$ is the amount of nitrate in recharge entering the aquifer on day i ($kg\ N\ ha^{-1}$),

Q_{gw} is the groundwater flow into the main channel on day i (mm),

$aq_{sh,i}$ is the amount of water stored in the shallow aquifer at the end of day i (mm),

W_{revap} is the amount of water moving into the soil zone in response to water deficiencies on day i (mm),

$W_{rchr,dp}$ is the amount of recharge entering the deep aquifer on day i (mm).

Similarly, the N lost by revap process or by percolation to the deep aquifer is calculated by the same equation but instead of calculating the fraction depending on the groundwater pathway flow, it is used the given flow pathway with respect to the total water volume.

The transport of organic N is controlled by the sediment movement. Thus, the transport of organic N depends on the concentration of organic N in the top 10 mm of soil ($g\ N\ t^{-1}$), the sediment yield on a given day (t), extension of the HRU and N enrichment ratio of the sediment (-). More information about organic N transport can be found in Neitsch et al., (2009).

Nutrient Transformation

The SWAT code can simulate the cycles of the nitrogen and phosphorus as well as the degradation of the pesticides. Due to the orientation of the current Thesis work, in this section only the processes related to the N cycle are described.

The soil N is represented by five different pools, which consider both mineral and organic forms (Figure 2-17). The mineral N is divided into two pools, ammonia (NH_4) and nitrate (NO_3). The organic N is divided into the active and stable pools associated to the humic substances ($orgN_{act}$ and $orgN_{sta}$, respectively), and the fresh pool ($orgN_{fresh}$), associated to the crop residue. The humic substances were divided into two pools (the Active and Stable) due to the necessity of distinguishing between the different biodegradation rates of this kind of compounds. Thus, the fraction of humic substances that is easily biodegradable is characterized within the active pool and the fraction that is considered inert, within the stable one.

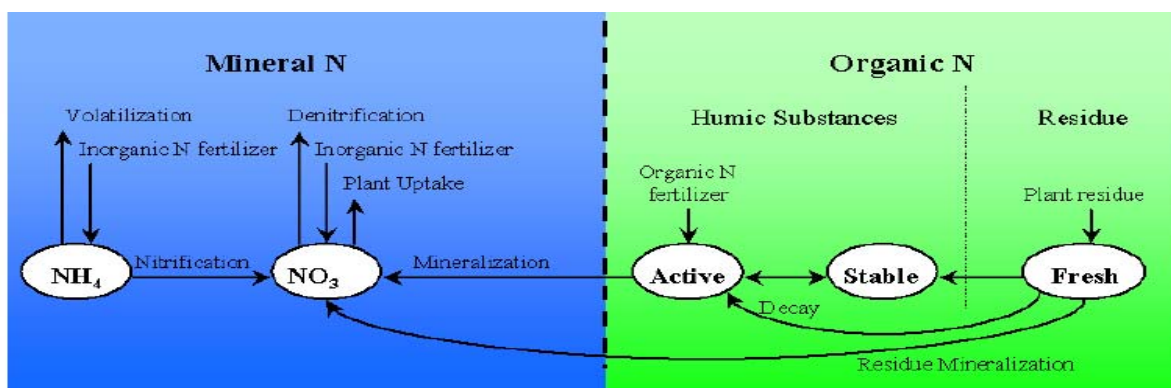


Figure 2-17. Different N pools and main processes that move the N in and out of pools (Neitsch et al., 2009).

The N is added to the system by the fertilization, with the crop residues and by atmospheric deposition. It can be lost by the vegetation N uptake, volatilization, denitrification, erosion or nitrate leaching. The main N transformation processes are described next.

Mineralization/Inmobilization

The nitrogen mineralization algorithms in SWAT are net mineralization algorithms which incorporate immobilization into the equations (Neitsch et al., 2009). These algorithms were adapted from the PAPRAN mineralization code (Seligmand and van Keulen, 1981). The mineralization is considered by two different sources: the fresh organic pool associated with the crop residue and the active pool associated with the soil humus. This process is dependent on the soil temperature and soil water content so, for their consideration in the mineralization simulation, the following factors (Equations 2-20; 2-21) were incorporated to the formulation.

$$Y_{temp} = 0.9 \frac{T_{soil}}{T_{soil} + \exp(9.93 - 0.312 * T_{soil})} + 0.1 \quad (2-20)$$

$$Y_{water} = \frac{\Theta}{\Theta_{FC}} \quad (2-21)$$

Where:

Y_{temp} is the nutrient cycling temperature factor (-),

Y_{water} is the nutrient cycling water factor (-),

T_{soil} is the soil temperature ($^{\circ}C$),

Θ is the water content (mm),

Θ_{FC} is the water content at field capacity (mm).

Thus, the humus mineralization and the residue decomposition and mineralization are calculated by the code. For the calculation of **humus mineralization**, it has to be considered that only the N within the active pool is allowed to transfer into the nitrate pool. Even though, the nitrogen is allowed to move between the active and stable pools according to the Equation 2-22. This equation represent the amount of N moving from one pool to the other, the positive value meaning that the transformation process occurs towards the stable pool and the negative value, towards the active.

$$N_{trns} = \beta_{trns} * orgN_{act} * \left(\frac{1}{fr_{act}} - 1 \right) - orgN_{sta} \quad (2-22)$$

Where:

N_{trns} is the amount of nitrogen transferred between the active and stable organic pools ($kg\ N\ ha^{-1}$),

β_{trns} is the rate constant ($=1E-5$) (d^{-1}),

$orgN_{act}$ is the amount of nitrogen in the active organic pool ($kg\ N\ ha^{-1}$),

fr_{act} is the fraction of humic nitrogen in the active pool ($=0.02$) (-),

$orgN_{sta}$ is the amount of nitrogen in the stable organic pool ($kg\ N\ ha^{-1}$).

Once the transferred amount has been calculated, the amount of N in the active organic pool is updated and the mineralization occurring from this pool can be obtained (Equation 2-23).

$$N_{hum-min} = CMN * (Y_{temp} * Y_{water})^{1/2} * orgN_{act} \quad (2-23)$$

Where:

$N_{\text{hum-min}}$ is the nitrogen mineralized from the humus active organic N pool (kg N ha⁻¹),

CMN is the rate coefficient for mineralization of the humus active organic nutrients (d⁻¹),

γ_{temp} is the nutrient cycling temperature factor (-),

γ_{water} is the nutrient cycling water factor (-),

orgN_{sta} is the amount of nitrogen in the active organic pool (kg N ha⁻¹).

When it is simulated a harvest and kill management operation, the fraction of biomass specified in the land cover's harvest index is removed from the HRU as yield. The remaining fraction of plant biomass is converted to residue and it is incorporated to the first soil layer. This **residue decomposition and mineralization** are dependent to a decay rate constant (Equation 2-24) calculated as a function of the nutrient factor (dependent on the C:N ratio of the residue), temperature factor and soil water content factor (Equations 2-25; 2-20; 2-21, respectively).

$$\delta_{\text{dec}} = \text{RSDCO} * Y_{\text{nutri}} * (\gamma_{\text{temp}} * \gamma_{\text{water}})^{1/2} \quad (2-24)$$

Where:

δ_{dec} is the residue decay rate constant (d⁻¹),

RSDCO is the rate coefficient for mineralization of the residue fresh organic nutrients (d⁻¹),

γ_{nutri} is the nutrient cycling nutrient factor (-),

γ_{temp} is the nutrient cycling temperature factor (-),

γ_{water} is the nutrient cycling water factor (-).

$$Y_{\text{nutri}} = \exp\left(-0.693 * \frac{\text{C:N}-25}{25}\right) \quad (2-25)$$

Where:

γ_{nutri} is the nutrient cycling nutrient factor (-),

C:N is the C:N ratio on the residue defined by the Ecuación 2-26 (-).

$$\text{C:N} = \frac{0.58 * \text{Rsd}}{\text{orgN}_{\text{fresh}} + \text{NO}_3} \quad (2-26)$$

Where:

C:N is the C:N ratio on the residue (-),

Rsd is the residue amount (kg ha⁻¹),

$\text{orgN}_{\text{fresh}}$ is the nitrogen in the fresh organic pool (kg N ha⁻¹),

NO₃ is the amount of nitrate (kg N ha⁻¹).

The decay rate constant defines the fraction of the residue that is broken down and it is used to divide the part of the residue that is mineralized and incorporated to the nitrate pool (Equation 2-27) and the part that is decomposed and incorporated to the nitrogen in active organic pool (Equation 2-28).

$$N_{\text{fresh-min}} = 0.8 * \delta_{\text{dec}} * \text{orgN}_{\text{fresh}} \quad (2-27)$$

$$N_{\text{fresh-dec}} = 0.2 * \delta_{\text{dec}} * \text{orgN}_{\text{fresh}} \quad (2-28)$$

Where:

$N_{\text{fresh-min}}$ is the nitrogen mineralized from the fresh organic N pool and added to the nitrate pool (kg N ha⁻¹),

$N_{\text{fresh-dec}}$ is the nitrogen decomposed from the fresh organic N pool and added to the active organic pool (kg N ha⁻¹),

δ_{dec} is the residue decay rate constant (d⁻¹),

$\text{org}N_{\text{fresh}}$ is the nitrogen in the fresh organic pool (kg N ha⁻¹).

Volatilization/Nitrification

Similarly to the residue decomposition and mineralization formulation, the ammonium volatilization and nitrification processes are calculated based on a first order kinetics equation (Equation 2-29). According to this equation, the total amount of ammonia lost by volatilization or nitrification is calculated first considering the ammonia amount and environmental factors and then, the amount is divided between **volatilization** process and **nitrification** process according to the fraction removed by each process (Equation 2-30; 2-31).

$$\delta_{\text{nit-vol}} = NH_4 * (1 - \exp[-\eta_{\text{nit}} - \eta_{\text{vol}}]) \quad (2-29)$$

Where:

$\delta_{\text{nit-vol}}$ is the amount of ammonium converted via volatilization and nitrification (kg N ha⁻¹),

NH_4 is the amount of ammonium (kg N ha⁻¹),

η_{nit} is the nitrification regulator (-),

η_{vol} is the volatilization regulator (-).

$$N_{\text{nit}} = \frac{fr_{\text{nit}}}{fr_{\text{nit}} + fr_{\text{vol}}} * \delta_{\text{nit-vol}} \quad (2-30)$$

$$N_{\text{vol}} = \frac{fr_{\text{vol}}}{fr_{\text{nit}} + fr_{\text{vol}}} * \delta_{\text{nit-vol}} \quad (2-31)$$

Where:

N_{nit} is the amount of ammonium converted via nitrification (kg N ha⁻¹),

N_{vol} is the amount of ammonium converted via volatilization (kg N ha⁻¹),

fr_{nit} is the estimated fraction of nitrogen lost by nitrification (-),

fr_{vol} is the estimated fraction of nitrogen lost by volatilization (-),

$\delta_{\text{nit-vol}}$ is the amount of ammonium converted via volatilization and nitrification (kg N ha⁻¹).

The fractions of nitrogen lost by nitrification or volatilization are defined by the Equations 2-32 and 2-33, and the regulators considered in these equations are defined in the Equations 2-34 and 2-35.

$$fr_{\text{nit}} = 1 - \exp[-\eta_{\text{nit}}] \quad (2-32)$$

$$fr_{\text{vol}} = 1 - \exp[-\eta_{\text{vol}}] \quad (2-33)$$

Where:

fr_{nit} is the estimated fraction of nitrogen lost by nitrification (-),

fr_{vol} is the estimated fraction of nitrogen lost by volatilization (-),

η_{nit} is the nitrification regulator (-),

η_{vol} is the volatilization regulator (-).

$$\eta_{nit} = \eta_{temp} * \eta_{water} \quad (2-34)$$

$$\eta_{vol} = \eta_{temp} * \eta_{cat} * \eta_{prof} \quad (2-35)$$

Where:

η_{nit} is the nitrification regulator (-),

η_{vol} is the volatilization regulator (-),

η_{temp} is the nitrification/volatilization temperature factor (-),

η_{water} is the nitrification soil water factor (-),

η_{cat} is the volatilization cation Exchange factor (=0.15) (-),

η_{prof} is the volatilization depth factor (-).

Environmental factors considered in the volatilization and nitrification regulators are defined according to the following equations (Equations 2-36; 2-37; 2-38; 2-39).

$$\eta_{temp} = 0.41 \frac{T_{soil}-5}{10} \quad (2-36)$$

$$\eta_{water} = \frac{\Theta - \Theta_{WP}}{\Theta_{FC} - \Theta_{WP}} \quad (2-37)$$

$$\eta_{cat} = 0.15 \quad (2-38)$$

$$\eta_{depth} = 1 - \frac{depth}{depth + \exp(4.706 - 0.0305 * depth)} \quad (2-39)$$

Where:

η_{temp} is the nitrification/volatilization temperature factor (-),

η_{water} is the nitrification soil water factor (-),

η_{cat} is the volatilization cation Exchange factor (-),

η_{prof} is the volatilization depth factor (-),

T_{soil} is the soil temperature (°C),

Θ is the soil water content (mm),

Θ_{WP} is the soil water content at wilting point conditions (mm),

Θ_{FC} is the soil water content at field capacity (mm),

depth is the depth from the soil surface to the middle of the layer (mm).

Denitrification

Another process by which the nitrogen is lost from the system is the **denitrification occurring in soils**. The SWAT code calculates this process according to the soil carbon and nitrate source, a rate coefficient for the denitrification process and different environmental factors such as temperature and soil water content (Equation 2-40).

$$N_{denit} = NO3 * (1 - \exp[-CDN * Y_{temp} * Corg]) \quad (2-40)$$

Where:

N_{denit} is the amount of nitrogen lost by denitrification (kg N ha^{-1}),
 NO_3 is the amount of nitrate in the layer (kg N ha^{-1}),
 CDN is the rate coefficient for denitrification (d^{-1}),
 γ_{temp} is the nutrient cycling temperature factor (-),
 C_{org} is the amount of organic carbon in the layer (%).

The denitrification process occurs at anaerobic conditions, so the threshold water content needs to be established in the model in order to set which water content represent these conditions. Anaerobic conditions are considered by the code when the soil water content fraction is higher than the value established for SDNCO (Equation 2-41).

$$\frac{\theta}{\theta_{FC}} > \text{SDNCO} \quad (2-41)$$

Where:

θ is the soil water content (mm),
 θ_{FC} is the soil water content at field capacity (mm),
 SDNCO is the threshold value of nutrient cycling water factor for denitrification to occur (-).

Apart from the denitrification occurring in soils, the SWAT code also considers the **N losses in the shallow aquifer** attributed to the biological processes. This loss is simulated by first order kinetics according to the Equation 2-42.

$$\text{NO}_3_i = \text{NO}_3_{i-1} e^{(-kt)} \quad (2-42)$$

Where:

NO_3_i is the amount of nitrate in the shallow aquifer on day i (kg N ha^{-1}),
 NO_3_{i-1} is the amount of nitrate in the shallow aquifer on day $i-1$ (kg N ha^{-1}),
 k is the rate constant for denitrification in the aquifer (d^{-1}).

The rate constant for denitrification in the aquifer is not a parameter as in the case for soil denitrification and, in this case, the rate constant value is obtained by the establishment of HLIFE_NGW parameter (Equation 2-43).

$$\text{HLIFE_NGW} = \frac{0.693}{k} \quad (2-43)$$

Where:

HLIFE_NGW is the half life of the nitrate in the aquifer (d),
 k is the rate constant for denitrification in the aquifer (d^{-1}).

Vegetation Growth

The vegetation growth simulation in SWAT is based on the EPIC code (Williams et al., 1990), which assumes that the vegetation development can be simulated by the heat unit theory (Boswell, 1926). This theory postulates that plants have heat requirement that can be quantified and linked to time to maturity.

The heat units are defined as the difference of the daily mean temperature and the base temperature of each plant (Equation 2-44) and it is considered that the vegetation growing stage

is defined by the ratio between the accumulated heat units and the potential heat units necessary for the crop to reach maturity (Equation 2-45).

$$HU = (T_{\max} - T_{\min}) - T_{\text{base}} \quad (2-44)$$

$$\text{FrHU} = \frac{\text{Acc.HU}}{\text{PHU}} = \frac{\text{Acc.HU}}{\sum_{d=1}^m \text{HU}} \quad (2-45)$$

Where:

HU is the heat units accumulated on day i ($^{\circ}\text{C}$),

T_{\max} is the maximum temperature on day i ($^{\circ}\text{C}$),

T_{\min} is the minimum temperature on day i ($^{\circ}\text{C}$),

T_{base} is the base temperature from which heat units start to accumulate ($^{\circ}\text{C}$).

FrHU is the accumulated heat unit fraction (-),

Acc. HU is the accumulated heat unit amount ($^{\circ}\text{C}$),

PHU is the potential heat unit to reach maturity ($^{\circ}\text{C}$),

Thus, the code relates the accumulated heat unit fraction with the growing stage of each crop. In order to calculate this fraction it is necessary establishing for each crop the potential heat unit to reach maturity. There can be followed different procedures in SWAT. On the one hand, the PHU value can be directly given; on the other, it can be calculated from the planting and harvesting dates, considering that the harvest occur when the potential heat unit value is reached.

The plant **potential growth**, the biomass, is modeled by simulating leaf area development, light interception and conversion of intercepted light into biomass assuming a plant species-specific radiation-use efficiency. The leaf area index (LAI) value as well as the canopy height is calculated according to the relationship between the LAI and the accumulated heat unit fraction. The root depth is also obtained from the accumulated heat unit fraction and the maximum rooting depth established on the crop database.

This potential growth can be reduced if the vegetation has water, temperature or nutrient stress. In these conditions both **biomass** and **LAI** are affected.

The **potential nutrient uptake** by plants is calculated as the difference between the fraction of nitrogen in the plant biomass as a function of growth stage given optimal growing conditions and the actual nitrogen content. This potential uptake is distributed in depth, in a similar way than the potential transpiration, to consider the higher content of roots in the surface layers which carry a higher N uptake in those layers. To allow the underlying layers compensate a N deficit in the shallow layers, N_UPDIS parameter was incorporated. The N removed by vegetation is taken from the nitrate pool. When there is no enough nitrate in the soil to compensate the plant demand, the nitrogen stress is simulated.

On the other hand, the total plant biomass is divided into the crop yield, the part of biomass economically beneficial, and the crop residue. The fraction of this yield with regard to the total biomass is called the harvest index. This index is between 0 and 1 for the majority of crops. However, plants whose roots are harvested, as tubers, may have a harvest index greater than 1. The **actual harvest index** is updated daily by the code for each growing crop depending

on the potential harvest index, the fraction of accumulated heat units and a water deficiency factor.

Once the actual biomass and actual harvest index have been obtained, the crop yield is calculated. Considering the fraction of N within the biomass and the amount of crop yield, the amount of N returning to the soil as crop residue is implicitly calculated.

2.3.1.2. MODELO HIDRODINÂMICO (MOHID)

The MOHID (MOdelo HIDrodiâmico, *Hydrodynamic model*) code is a numerical modeling system that simulates in three dimensions the water and pollutant flow in different water bodies (estuaries, oceans, rivers and aquifers). It is being developed by the MARETEC group in the Instituto Superior Técnico (IST) from the Technical University in Lisbon. MOHID is a physics-based and totally distributed model. Although in its beginnings the code was focused on oceanic current simulation (Neves, 1985), it has been under extensive development giving the complex modeling system it is today (Braunschweig et al., 2004; Trancoso et al., 2009). Nowadays, the MOHID code allows simulating physical and biogeochemical processes both in water and soils. It is written in FORTRAN and it uses a finite volume approach (www.mohid.com). In the Figure 2-18 there are represented the main hydrological processes considered in hydrological watersheds.

MOHID is composed of three main executables: MOHID Water, MOHID Soil and MOHID Land, according to the code structure shown in the Figure 2-19. As it can be observed in the same figure, the different modules (rutines and subrutines in the code) are stored within three libraries or bases, which differ in the characteristics of the modules they store. Thus, in the first library, the modules are independent to the grid; in the second, the modules are grid dependent; and, in the third, the modules are those related to the Soil and Land executables, which have been incorporated recently to the code. There are different auxiliary tools which help during the pre and post processing of the data, some of them being included into the user interface MOHID Studio (Braunschweig et al., 2011).

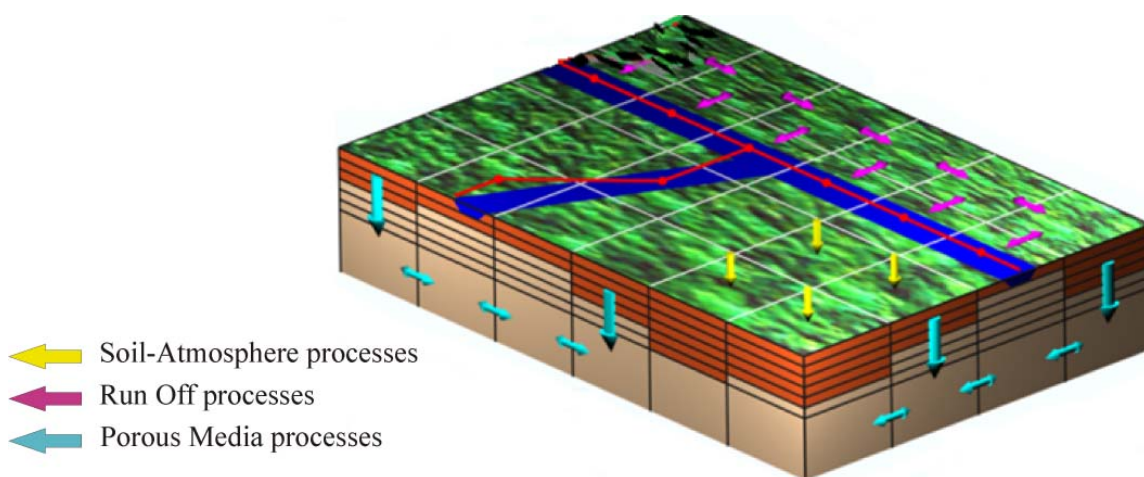


Figure 2-18. Main hydrological processes considered by the MOHID code (www.mohid.com).

The modules read the necessary information from data files that can be directly created in the code interface. These data files include:

-Atmosphere	-Porous Media
-Geometry	-RunOff
-Basin	-Porous Media Properties
-Basin geometry	-RunOff Properties
-Drainage Network	-Sediment Quality
-Model	-Discharges

The code employs a modular system, which means that the model can be characterized with the needed modules according to the objective of the study. Even so, some of the modules are completely necessary as they connect the other modules' simulated processes. For instance, the **Model** module is responsible for establishing, among others, the simulation length and time step characteristics; **Basin Geometry** and **Geometry** modules provide to the executable the information related to the watershed outlet location, threshold value used for drainage network delineation and number and thickness of the vertical layers; **Atmosphere** module provide the meteorological data to the executable; **Basin** module, apart from defining data related to watershed processes also establishes a link between different modules (**Drainage Network**, **Porous Media**, **Run Off**) to define the model time step and determines the optional modules to be considered by the model (**Vegetation**, **Porous Media Properties**, **Run Off Properties**, **Discharges**, **Sediment Quality**).

Whereas some of the data files are completely necessary for the executable to run (such as Geometry or Model in which the spatial discretization and the simulation time are defined) others are optional and they are only used if the objectives of the study require so. These data files define every keyword's value. The keywords that do not appear in these files take the default values established in the code.

This is an aspect to which special attention should be paid. Effectively, the fact of establishing the keyword's values from the text files makes indispensable to continuously check the MOHID code as it is the only way of getting to know which the last updated possibilities are. Thus, the keywords will allow establishing **parameters' values**, selecting the **processes** we want to consider, choosing between **simulation options**, establishing the **input and output file paths** and also selecting the **results time step**.

Apart from this kind of data, MOHID also use the spatially distributed one stored in **ASCII** or **Hierarchical Data Format** (HDF) files, which can be created by the same interface or by the auxiliary tools mentioned above. Although MOHID Studio allows visualizing these data, for the processing of the data in HDF files, programs such as "HDFView" are strongly recommended.

The MOHID code is based on different existing codes so as to obtain an integrated modeling of the watershed scale processes. Thus, the vegetation growth simulation is based on the SWAT code and the nutrient cycling and the microorganisms' growth on the RZWQM code (Ahuja et al., 1999).

The modeling of the hydrological processes is carried out by the resolution of algebraic equations obtained from the discretization of partial derivatives based on mass, momentum and energy conservation. In the following sections the main aspects concerning the model are described.

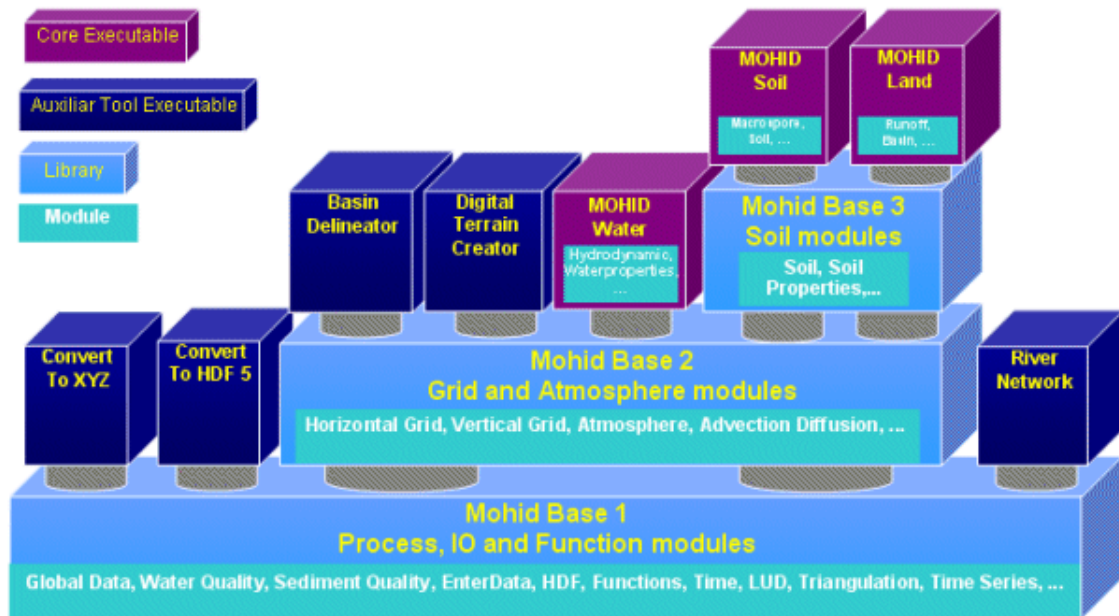


Figure 2-19. MOHID code structure and location of the libraries, modules and executables (www.mohid.com).

Model Discretization

The **spatial discretization** of the model is based on vertical layers and a grid constructed by orthogonal cells. The defined cells are the basis of the model since the temporal discretization and processes' simulation depend on their size and distribution. On the Figure 2-20 it is shown the spatial discretization process of the model: a) the grid size and the cells' resolution is established. According to this resolution, the Digital Terrain Model (MDT) and Digital Bottom Model (MDB) maps are rearranged and their grid data file is created; b) the number of vertical layers and their thickness is specified in the Geometry module, considering that the maximum thickness defined by the MDT and MDB must be reached; c) the soil horizons are defined in the Porous Media module; and d) the executable rearranges the bottom depth in order to deepest layer's bottom and MDB's base coincide and the final discretization is reached.

The bottom depth rearrangement mentioned above is indispensable in order to obtain a MDB file which level coincides with the base level of the deepest layer of the model. Thus, the MDB introduced first by the user is replaced by the file created during the rearrangement. This should be also considered when the porous media's thickness is being evaluated. The simplest way of checking the total thickness consists on the extraction of the MDB to the MDT and the visualization of the resulting file. However, it is important noting that the real thickness being considered by the model is the extraction of the rearranged MDB file to the MDT.

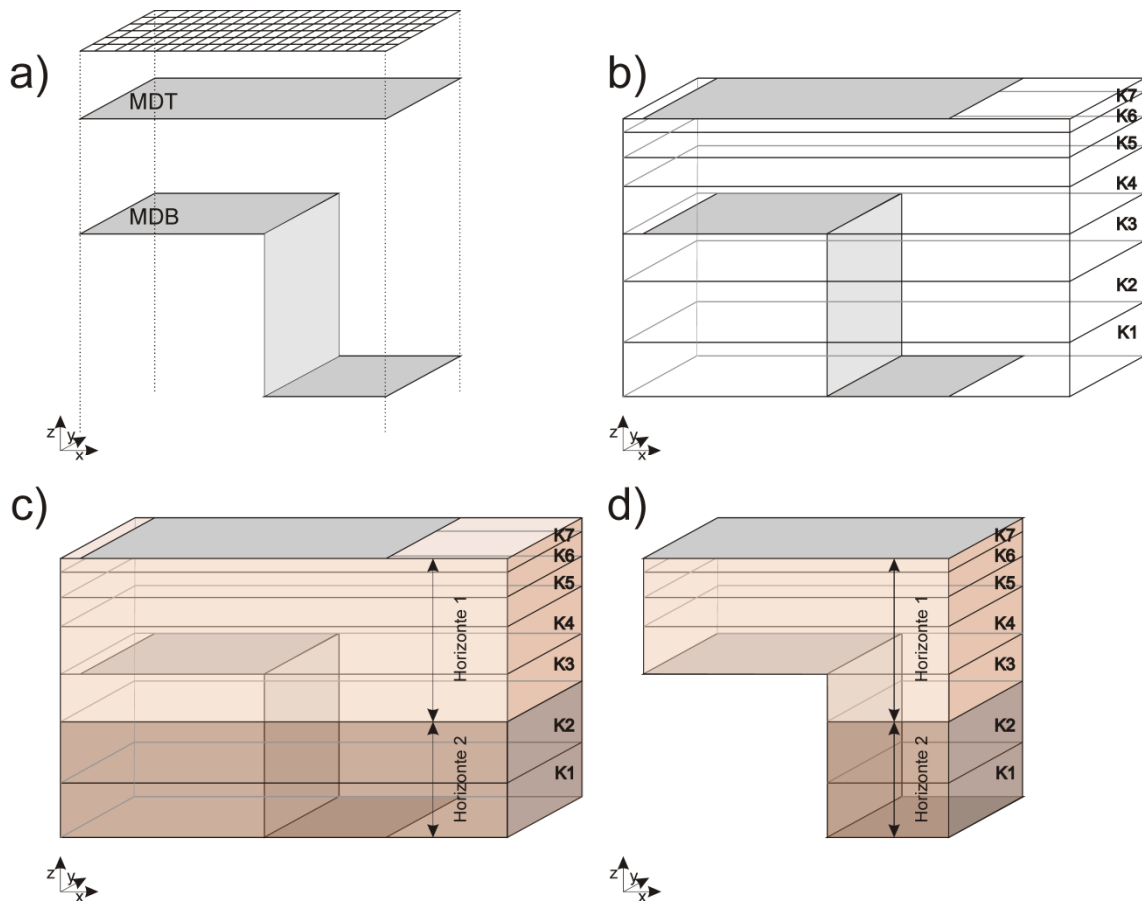


Figure 2-20. Representation of the spatial discretization process.

The **temporal discretization** of the model is variable and strongly linked to its numerical stability. Although in the current Thesis work this is not studied in detail, it is important to highlight that there are different convergence conditions (limitation of a maximum water volume variation or Courant condition in the case of surface and channel runoff) by which the model can be forced to find the numerical solution by cutting the time steps.

The actual time step of the model (DT) is modified by the Basin module, which interacts with the modules in charge of simulating the water flow (Atmosphere, Porous Media, RunOff and Drainage Network) and establishes which is the minimum time step required by them.

The user must establish the values of stability-related keywords and the convergence of the model and the computational time required by it will strongly depend on them. As mentioned above, the stability can be reached by two different options. On the one hand, there is the limitation of a maximum water volume variation. This limit is set by the STABILIZE keyword, which allows the model to cut the DT into several iterations (as maximum the value established in the MAX_ITERATIONS keyword) until the water volume variation in the DT is lower than the value established in the STABILIZE_FACTOR keyword.

When a module requires more iterations than the value established by the MAX_DT keyword, the module asks to the Basin module a shorter DT for the resolution of the equations in the following time interval. This shorten of the DT is carried out considering the value of the DT_FACTOR_DOWN keyword. On the contrary, if the modules resolve the equations with no

need of dividing the DT into iterations, they to the Basin module a longer DT for the resolution of the equations in the following time interval. This lengthening of the DT is carried out considering the value of the DT_FACTOR_UP keyword. In a generalized manner, this DT limitation carries the model to be cut into short DTs when the water volume variation is high and into larger DTs when the water volume variation is low.

On the other hand, there is another way of trying to achieve the stability, which is by the use of the Courant number. This stability method is used for surface and channel runoff water flow simulation and it can be activated by the LIMIT_DT_COURANT keyword. According to this method, the DT is not divided into iterations but it depends on the Courant number established by the MAX_COURANT keyword, the distance between two adjacent cells and the flow velocity.

It is not the objective of this study to define in detail all these keywords and their implications in the model, so to get further information, specific books and scientific papers related to numerical approximations for flow simulation are recommended.

Physics Base of MOHID

A physics-based model is based on fluids mechanics, part of the physics that studies the fluid movements and the forces that cause them (Mott, 1996). As in many aspects of the science, in fluids mechanics there are also assumed several hypotheses, of which the most important according to the present work are the fulfillment of the mass, momentum and energy conservation laws.

The **conservation of mass** expresses that the difference of volume of water going in and out of a control volume will be equivalent to the change in the stored quantity (Equation 2-46).

$$\text{Accummulation} = \text{In} - \text{Out} \quad (2-46)$$

The law of **conservation of momentum** law states that the movement state of a body or water volume (velocity or direction) will only change if a force upon it changes.

According to the law of **conservation of energy**, the total mechanic energy of an isolated system remains constant, the mechanic energy being the sum of the kinetic energy (due to the velocity) and potential energy (due to the pressure and position; Equation 2-47).

$$E_{\text{mec}} = E_c + E_{p'} = E_c + (E_p + E_h) \quad (2-47)$$

Where:

E_{mec} is the mechanical energy ($\text{g m}^2 \text{s}^{-2}$),

E_c is the kinetic energy ($\text{g m}^2 \text{s}^{-2}$),

$E_{p'}$ is the potential energy ($\text{g m}^2 \text{s}^{-2}$),

E_p is the pressure energy ($\text{g m}^2 \text{s}^{-2}$),

E_h is the position energy ($\text{g m}^2 \text{s}^{-2}$).

Due to the slow movement of the groundwater, as well as other assumptions made in hydrogeological studies, the mechanical energy is defined according to pressure and position terms, which divided by unit of weight, could be defined in terms of head (Figure 2-48).

$$p + z = H \quad (2-48)$$

Where:

p is the pressure head (m),

z is the elevation head (m),

H is the hydraulic head (m).

Flow equations

Being MOHID a physics-based model, it resolves the governing laws by the spatio-temporal discretization and gives approximated solutions in each of the control volume defining the system.

According to the **Darcy's equation** (Darcy, 1856), which states that the flow between two points which hydraulic head gradient is ΔH , through a volume filled by saturated sand of length L and section A, can be quantified by the Equation 2-49.

$$Q = \frac{K_s * A * \Delta H}{L} \quad (2-49)$$

Where:

Q is the water flow ($m^3 s^{-1}$),

K_s is the saturated hydraulic conductivity ($m s^{-1}$),

A is the section (m^2),

ΔH is the hydraulic head gradient (m),

L is the length (m).

In 1907, **Buckingham** proposed a variation to the Darcy's law equation based in the assumption, among others, that the hydraulic conductivity of a non-saturated soil depends on the matric potential, which is the equivalent of the pressure head. Thus, the Darcy's law for unsaturated soils was defined according to the Equation 2-50 known as the **Buckingham-Darcy** equation.

$$q = -K(h) \frac{\partial(h+z)}{\partial z} = -K(h) \frac{\partial H}{\partial z} \quad (2-50)$$

Where:

q is the water velocity ($m s^{-1}$),

$K(h)$ is the unsaturated hydraulic conductivity ($m s^{-1}$),

h is the pressure head (m),

z is the elevation head (m),

H is the hydraulic head (m).

The combination of the Buckingham-Darcy equation with the continuity equation gives the **Richard's equation** which, for the vertical direction, can be written according to the Equation 2-51.

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad (2-51)$$

Where:

Θ is the water content ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$),

t is the time (s),

z is the distance (m),

$K(h)$ is the unsaturated hydraulic conductivity (m s^{-1})

h is the pressure head (m).

This equation can be written in terms of both water content or pressure head (equivalent to the matric potential). For its resolution it is necessary to employ matric potential-water content functions described by authors such as Brooks and Corey (1964) or van Genuchten (1980). Concretely, the MOHID code employs the equation proposed by Van Genuchten (Equation 2-52) and to obtain the hydraulic conductivity from the matric potential, the equation proposed by Mualem (1976) (Equation 2-53; 2-54).

$$\Theta(h) = \Theta_r + \frac{\Theta_s - \Theta_r}{[1 + |\alpha h|^n]^m} \quad (2-52)$$

$$K(\theta) = K_s * Se^L \left(1 - \left[\left(1 - Se^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \right) \quad (2-53)$$

$$Se = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2-54)$$

Where:

$\theta(h)$ is the volumetric water content for a given matric potential ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$),

θ_r is the volumetric residual water content ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$),

θ_s is the volumetric water content at saturation conditions ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$),

α , n and m are shape parameters from van Genuchten equation (-),

Se is the effective saturation or relative water content ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$),

L is an empirical pore-connectivity parameter (-).

Each cell of the model is characterized for several properties (water content, position, hydraulic head, hydraulic conductivity, nutrient concentration), which are used in order to calculate the flow within adjacent cells. Once calculating a water balance considering every process affecting the water content of a cell, the unsaturated hydraulic conductivity and hydraulic head gradients can be deduced, with which, the flow between adjacent cells is calculated. In the Figure 2-21 it is shown a schematic representation of the flow between adjacent cells.

Another aspect that needs to be considered is the horizontal factor of the hydraulic conductivity used for the calculation of the horizontal flow. This value multiplies the unsaturated conductivity calculated by the Equation 2-50 used for estimating the horizontal directions (u and v) in order to simulate the velocity differences in the stratified materials.

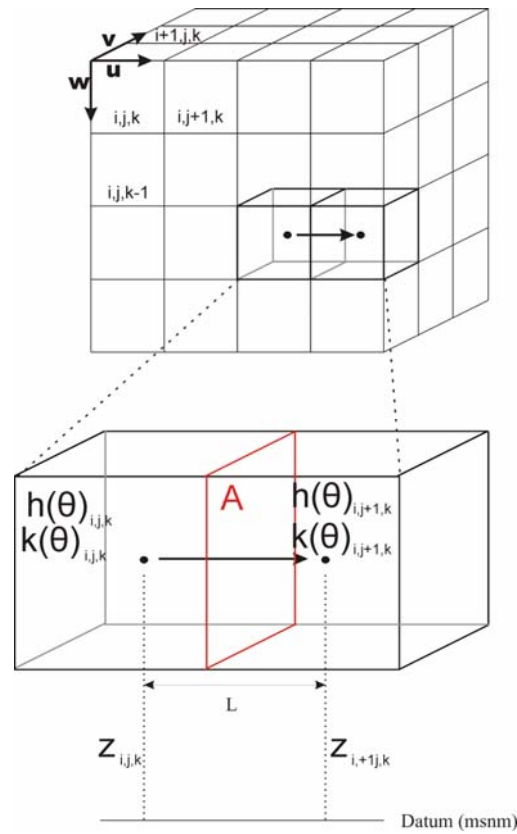


Figure 2-21. Schematic representation of flow between adjacent cells.

Thus, known the inflow and outflow of every cell in each direction, a mass balance is calculated to obtain the new water content (Equation 2-51).

$$\theta^{t+\Delta t} = \frac{\theta^t * Vol + (Qu, v, w) * \Delta t}{Vol} \quad (2-51)$$

Where:

$\theta^{t+\Delta t}$ is the volumetric water content on $t+\Delta t$ ($m^3 m^{-3}$),

θ^t is the volumetric water content on t ($m^3 m^{-3}$),

Vol is the volumen of the cell (m^3),

Qu is the difference of inflow and outflow in u direction ($m^3 s^{-1}$),

Qv is the difference of inflow and outflow in v direction ($m^3 s^{-1}$),

Qw is the difference of inflow and outflow in w direction ($m^3 s^{-1}$),

Δt is the time step (s).

The new water content of the cells is also used to update the water table location. The code starts checking from the deepest cell upwards which is the first saturated cell and it locates the water table within the overlaying cell. Next, the code checks if the water content on this overlying cell is above or below the field capacity conditions.

If, $\theta < \theta_{FC}$, the water table level is located on the bottom of the overlying cell;

If, $\theta > \theta_{FC}$, the water table level is calculated by a linear relationship between cell's thickness and the water content over the field capacity conditions (Figure 2-22).

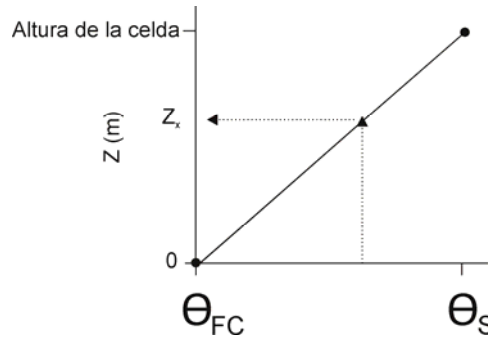


Figure 2-22. Water table level conceptualization.

The volumetric water content at field capacity conditions, θ_{FC} , has been traditionally described as the amount of soil water after the excess water has drained away and the rate of downward movement has materially decreased. However, this definition does not lend to a quantitative approach for the estimation of θ_{FC} (Twarakavi et al., 2009) and thus, it has been operatively approximated at values of the matric potential ranging from -1 to -50 k Pa, with -33 k Pa as a generally accepted reference value. Instead of using this reference value, the MOHID code estimates the water content at field capacity from the soil water retention curve proposed by van Genuchten, for which it assumes that the pressure head (m) of a layer at FC conditions is the negative value of the half of its thickness (m).

When the precipitation reaches the soil, it can also contribute to the soil water if it is infiltrated and not lost by the surface runoff. Accordingly to the soil water flow, the infiltration process is simulated by the Richard's equation, meaning that hydraulic conductivity of the topmost layers and the hydraulic gradients created will dominate the process. There is a factor, though, that can limit the infiltration amount, which is the impermeability fraction assigned to the land surface. This limiting factor will reduce the infiltration amount calculated by Richard's equation and the water balance will be defined by the Equation 2-52.

$$\theta^{t+\Delta t} = \frac{\theta^t * Vol + [(Qw) * \Delta t (1 - imper)]}{Vol} \quad (2-52)$$

Where:

$\theta^{t+\Delta t}$ is the volumetric water content on $t+\Delta t$ ($m^3 m^{-3}$),

θ^t is the volumetric water content on t ($m^3 m^{-3}$),

Vol is the volume of the cell (m^3),

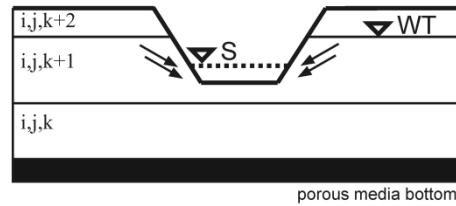
Qw is the vertical flow ($m^3 s^{-1}$),

Δt is the time step (s),

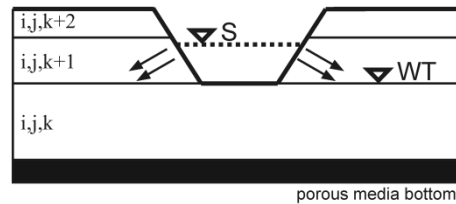
imper is the impermeability fraction (-).

Another aspect of great influence above the simulated water content of the cells is the simulated flow between the porous media and the channels. The channels are characterized as a set of nodes and segments, the nodes being defined by certain morphology and located in the center of the cells, and the segments being just connectors through which the water flows from one node to another. According to the hydrological conditions and channels' morphology, three different conditions can occur (Figure 2-23).

Case 1: Effluent river



Case 2: Influent river



Case 3: No flow

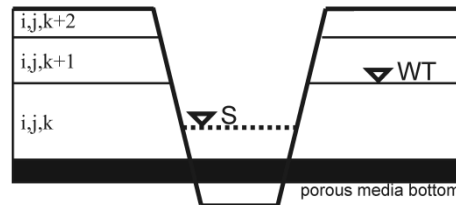


Figure 2-23. The relationship between river and aquifer.

In the case of partially penetrating channels, two different conditions can happen. On the one hand, if the water table level in the porous media is higher than the channel water level, then, the flow will occur from the porous media to the river (1; Figure 2-23). On the other, if the water table level in the porous media is lower than the channel water level, then, the flow will occur from the river to the porous media (2; Figure 2-23). In any of these cases, it has to be considered that to calculate the hydraulic gradient between porous media and river, the code uses the conductivity of the porous media's layer in which the water table is located. Indeed, when the aquifer discharges water to the river, the layer that discharges is the one in which the water table is located. In the case of the totally penetrating channels (3; Figure 2-23) there is not interaction between the porous media and the river.

The surface runoff is also based on physical laws and it is simulated by the Saint Venant equations. Depending on the assumed simplifications these equations can be resolved by different approaches.

The **dynamic wave** considers all the terms of the Saint Venant equation, representing the inertial movement (local and convective acceleration) and the pressure, gravitational and friction terms (Equation 2-53). The **diffusion wave** assumes that inertial term is negligible. The **kinematic wave** is the simplest approximation and it assumes that the friction and gravitational forces are balanced. This kind of approximation only allows the water flowing downstream.

$$\frac{\partial V}{\partial t} + V \frac{\partial V}{\partial x} + g \frac{\partial y}{\partial x} - g(S_0 + S_f) = 0 \quad (2-53)$$

Where:

V is velocity (m s⁻¹),

t is time (s),

x is distance along the longitudinal axis of the watercourse (m),

y is the water-surface elevation above an arbitrary datum (m),

S₀ is the bottom slope of the watercourse (-),

S_r is the friction slope which is evaluated by Manning's equation (-; Equation 2-54).

$$v = \frac{Rh^{2/3} \sqrt{S}}{n} \quad (2-54)$$

Where:

v is the mean velocity in the cross section (m s⁻¹),

Rh is the hydraulic radius (m),

S is the slope (-),

n is the Manning's coefficient (s m^{-1/3}).

In any case, the current Thesis work has not been focused on the numerical approximations of the water flow simulation. So, for a further reading of this methodology theme's specific books are recommended.

To carry out the calculation of water flow in the channels, it must be specified by the user the morphology of each Strahler order, which can have a trapezoidal form (Figure 2-24) or it can be meticulously defined.

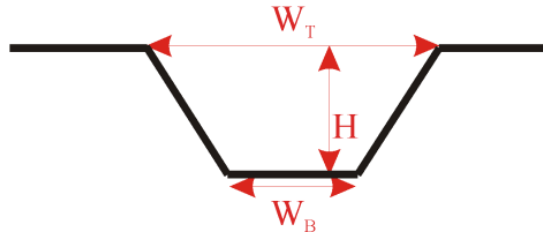


Figure 2-24. Channel morphology definition; H: Height, W_T: Top length and W_B: Bottom length.

Transport equations

From the mass conservation principle it can be derived an equation describing the transport and the dispersion of a solute (Equation 2-55).

$$-\frac{\partial}{\partial x}(u_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(u_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(u_z C) + \frac{\partial}{\partial x}\left(E_x \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(E_y \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(E_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) + Sk = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2-55)$$

Where:

C is the concentration of the substance (mg l⁻¹),

u_x, u_y, u_z are the velocity components (m s⁻¹) in the three coordinate directions (x,y,z),

E_x, E_y, E_z are the longitudinal, transversal and vertical components of the dispersion (-),

Sk is the source-sink term (mg l⁻¹),

t is the time (s).

According to this equation, in each of the control volumes there is an accumulation of a substance that depends on the input and output carried by the convective and dispersive transport and by the source-sink term.

The first term of the equation represents the **advective** transport. This kind of transport is due to the movement of the water flow. The second term is related to the **diffusive** transport. It considers the processes affecting the substances' transport that are not related to the movement of the water volumes, as there are, the **molecular diffusion** and the **mechanical dispersion**. Due to the difficulty of distinguishing both processes in the practice, it is common to group them into the term **hydrodynamic dispersion**.

In short time periods the diffusion and the advection processes might be of similar importance on the transport of a certain substance. Even though, in larger time periods, and so, in a larger scale, the advective transport is the one of greater magnitude, excepting in aquicludes and aquitards where the advective transport can be negligible (Oyarzun, 2007).

The pollutant transport modeling in physics-based codes is usually done by the advection-dispersion equation (ADE) which describes the transport due to the "dragging" by the water flow and due to the pollutant propagation. Thus, whereas the advection is mainly controlled by the hydraulic conductivity of a medium, the propagation depends on the flow velocity and the concentration gradients.

Watershed scale hydrological processes

Apart from the simulation of physical processes, MOHID considers other hydrological process by a conceptual approach. These, are of great importance as they contribute to the input or output of water from the modeled system and so, they also affect to the cells' water balance mentioned in the previous section.

One of the most important processes contributing to the loss of water from hydrological systems is the **evapotranspiration** (ET). The ET is composed by the **evaporation** (E), occurring in the topmost soil layer, and the **transpiration** (T), occurring in the soils according to the root development of the vegetation. The calculation of the actual ET requires several steps before it can be quantified. First, the **reference evapotranspiration** (ET_0) is obtained by the Penman-Monteith method according to the meteorological limitations. This calculation is carried out by the Atmosphere module. Then, the Basin module obtains the **crop evapotranspiration** (ET_c) using the **crop coefficients** (K_c) established by the user and the ET_0 calculated in the previous step (Equation 2-56).

$$ET_c = ET_0 * K_c \quad (2-56)$$

The K_c is a key parameter for the ET simulation and its value is function of: (i) the canopy radiation absorption; (ii) the kind of canopy; (iii) the crop physiology; (iv) the crop growing stage; and (v) the water content in the soil (Snyder et al., 2007). Generally, the K_c development is represented for each crop type and the K_c values are given for three growing stages (Figure 2-25).

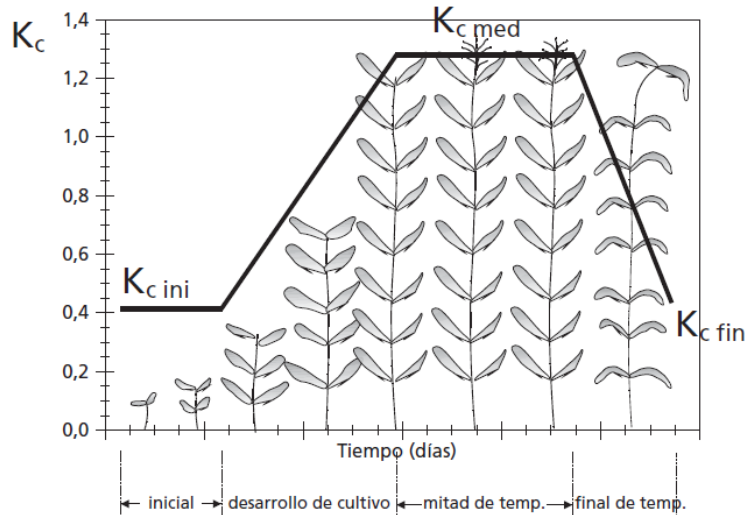


Figure 2-25. Representation of the K_c and the crop development relationship (Allen et al., 1998).

The ET_c , could be then defined as the ET occurring in standard conditions, which are: disease extent and optimum nutrient, soil and water conditions, which means that with these conditions the crops reach the optimal productivity according to the meteorological limitations of the study area.

In a next step, the ET_c is divided into **potential transpiration** (T_p) and **potential evaporation** (E_p) (Equations 2-57; 2-58), process based on the Leaf Area Index (LAI) value which, in turn, is simulated according to the heat units theory described in the previous section.

$$T_p = ET_c * (1 - e^{-0.463 * LAI}) \quad (2-57)$$

$$E_p = ET_c - T_p \quad (2-58)$$

Once these potential values have been obtained, the code calculates the actual amounts based on the water availability. The **actual transpiration** (T_r) is estimated by the Vegetation module and its value is limited by the soil water content according to the function proposed by Feddes et al. (1978). Thus, the T_p is reduced according to a water stress factor, α (Equation 2-59), which depends on the pressure head of the cell, considering the stress caused by both too low and too high water conditions (Figure 2-26). Similarly to the SWAT code, the T_p amount is also distributed in depth according to the simulation of the root distribution so the limitation of water stress is calculated once this aspect has been considered.

$$T_r = T_p * \alpha \quad (2-59)$$

In this figure, it is represented the dependency of the water stress factor above the pressure head of the soil. As it can be observed, the stress factor value can be calculated according to linear relationships between the pressure head values h_1 , h_2 , h_{3l} , h_{3h} and h_4 . Thus, when the pressure head is higher than h_1 or lower than h_4 , the water stress factor's value is 0 and thus, there is no transpiration. On the contrary, when the pressure head is between h_2 and h_3 , the water stress factor's value is 1 and thus, the actual transpiration is the potential transpiration. When the pressure head is between h_4 and h_3 or between h_1 and h_2 , the water

stress factor's value is obtained by a linear relationship. It has to be considered that in the Figure 2-26 appear two values of the h_3 pressure head, which are due to differences in the potential transpiration values. Even though, Feddes et al. (1978) and the MOHID code consider a unique h_3 value.

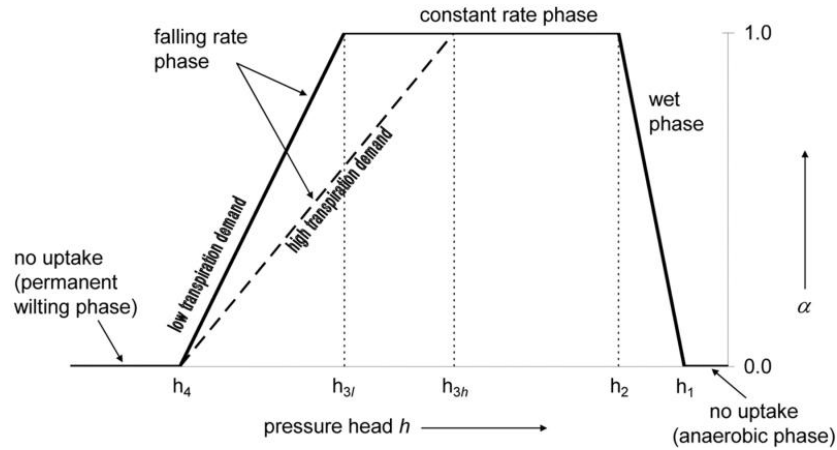


Figure 2-26. Water stress factor according to the pressure head (Jong van Lier et al., 2008).

With regard to the **actual evaporation** (E_r), it is first simulated from the canopy and water soil water column by the Basin module and then, from the porous media by the Porous Media module. While all of the evaporation processes are calculated according to the evaporative demand, the third type can be limited to different factors such as the hydraulic conductivity, residual water content of the cell or a maximum pressure head value.

Once the fluxes can be quantified, they are considered in order to calculate the new water content of the cells (Equation 2-60; 2-61).

$$\theta^{t+\Delta t} = \frac{\theta^t * Vol - Q_{transp} * \Delta t}{Vol} \quad (2-60)$$

$$\theta^{t+\Delta t} = \frac{\theta^t * Vol - Q_{evap} * \Delta t}{Vol} \quad (2-61)$$

Where:

$\theta^{t+\Delta t}$ is the volumetric water content on $t+\Delta t$ ($m^3 m^{-3}$),

θ^t is the volumetric water content on t ($m^3 m^{-3}$),

Vol is the volumen of the cell (m^3),

Q_{transp} is transpired flow ($m^3 s^{-1}$),

Q_{evap} is evaporated flow ($m^3 s^{-1}$),

Δt is the time step (s).

Vegetation Growth

The vegetation growth simulation of the MOHID code is based on the code of SWAT, due to this reason, every variable simulated by the Vegetation module (transpiration, biomass, crop yield...) is calculated for a daily time step. Although most of the formulation is thus quite similar in both codes, in MOHID new implementations are being carried out (root distribution,

N uptake...) in order to include other simulation approaches. As these are still under full development, their use is quite limited yet.

As in the SWAT code, the **Leaf Area Index** (LAI) and the **canopy height** are simulated according to the accumulated heat unit fraction, and the **root depth**, according to both this fraction and the maximum rooting depth established on the crop database. Then, the **potential growth** or **biomass** is modeled by simulating leaf area development, light interception and conversion of intercepted light into biomass assuming a plant species-specific radiation-use efficiency. The potential growth and LAI can be reduced if the vegetation has water, temperature or nutrient stress. The global stress factor can be obtained by multiplicative or minimum specific stress consideration of the different factors (Equation 2-62; 2-63), where each factor stress is calculated according to the plant actual content above the potential content.

$$F_{\text{stress}} = \min(F_{\text{water}}, F_{\text{temp}}, F_{\text{nutrient}}) \quad (2-62)$$

$$F_{\text{stress}} = F_{\text{water}} * F_{\text{temp}} * F_{\text{nutrient}} \quad (2-63)$$

Where:

F_{stress} is the global stress factor (-),

F_{water} is the water stress factor (-),

F_{temp} is the temperature stress factor (-),

F_{nutrient} is the nutrient stress factor (-).

The crop yield formulation in the MOHID code is exactly the same as in the code of SWAT. Though, from this modeling experience several points could be highlighted with regard to the MOHID simulated results. Accordingly to other simulated variables, the simulated crop yield value can be checked by both time series and HDF files. In order to obtain a watershed's representative value, though, there would be needed numerous time series locations, which has been seen not to be stable for the moment. Thus, for large scales, the results in HDF format become necessary. It needs to be taken into account that the **biomass yield** value is written by the code for the harvesting date of each crop, so in order to know which crop belongs each simulated value is it recommended that every crop has a different harvest date. This has been found to be the easiest way to obtain crop specific biomass yield.

With regard to the nutrient uptake, there are several methods for calculating this variable. On the one hand, MOHID can base the nutrient uptake on the uptake of water. This option seems to be the most realistic but its functioning should be checked as it generally simulates a too low uptake. On the other hand, MOHID also incorporates the formulation of the SWAT code to simulate this process. According to SWAT, the potential uptake is calculated as the difference between the fraction of nitrogen in the plant biomass as a function of growth stage given optimal growing conditions and the actual nitrogen content, and from this potential value, the actual one can be calculated according to the simulated root distribution.

Nutrient Transformation

The formulation for the nutrient transformation simulation is based on the RZWQM code (Root Zone Water Quality Model; Ahuja et al., 1999) and it is carried out by the Sediment Quality module. This module simulates all the soil processes based on the microorganisms'

activity. Thus, the microorganisms are explicitly simulated and the nutrient transformation rates are function of the microorganisms' growth and death rates.

In Table 2-7 are shown all the nutrient pools considered by the code and in the Figure 2-27 all the transformation processes.

Mineral forms		Organic forms				
Oxygen	Carbon	Nitrogen	Phosphorous	Carbon	Nitrogen	Phosphorous
Oxygen	CO2	Ammonia	Inorganic_P_soluble	HeterotrophicC	HeterotrophicN	HeterotrophicP
	Methane	Nitrate	Inorganic_P_fix	AutotrophicC	AutotrophicN	AutotrophicP
		Ngas		AnaerobicC	AnaerobicN	AnaerobicP
		Urea		Labil_OM_C	Labil_OM_N	Labil_OM_P
		AmmoniaGas		RefractOM_C	RefractOM_N	RefractOM_P
				SoilC	SoilN	SoilP

Table 2-7. Mineral and Organic nutrient pools considered by the Sediment Quality module.

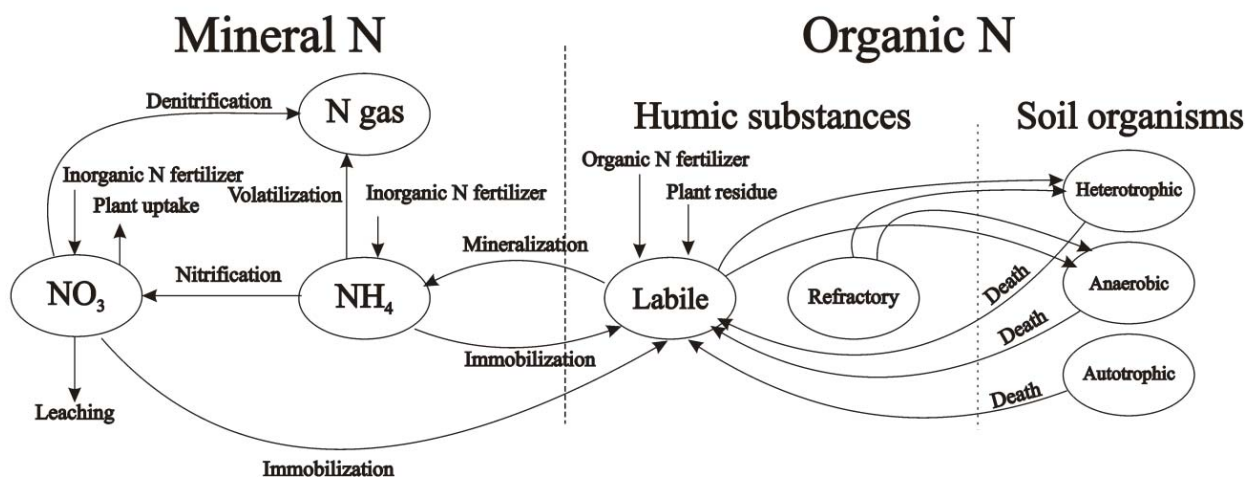


Figure 2-27. N transformation processes and pools considered by the Sediment Quality module.

The Sediment Quality module considers two main equations (Equation 2-64; 2-65) to carry out the nutrient transformation simulation, with which the code calculates the potential transformation rates and microorganisms' death rates. Depending on the microorganisms' family carrying out the transformation process, in the equations those microorganisms' population is considered.

$$\text{Rate max} = \left(\frac{K_b * T_p}{h_p} * A_{\text{decay}} * e^{\left[\frac{-E_a}{R_g * T_p} \right]} * \text{Microorg} \right) \quad (2-64)$$

$$\text{Rate death max} = \left(\frac{\frac{K_b * T_p}{h_p} * A_{\text{decay}}}{e^{\left[\frac{-E_a}{R_g * T_p} \right]}} * \text{Microorg} \right) \quad (2-65)$$

Where:

K_b is the Boltzman constant ($J K^{-1}$),

T_p is the temperatura (K),

h_p is the Planck constant (J s),

A_{decay} is the decay constant ($s d^{-1} \text{pop}^{-1}$),

E_a is the apparent activation energy (defined as $E_a = AE + K_p * I$, where I is the ionic strength, K_p is a coefficient and AE is the activation energy) ($Kcal mol^{-1}$),

R_g is the universal gas constant ($Kcal mol^{-1} K^{-1}$),

Then, the potential rate limiting factors according to each kind of transformation process are calculated:

- Temperature factor
- Oxigen factor
- pH factor
- Substrate factor (C, N, P)
- Aerobic or anaerobic condition factor

The information needed by the code is stored within the Sedimen Quality data file within the blocks **ConstructRate** and **ConstructMicroorg**, and the required data includes:

- **Calculation of the transformation rates:** Activatio energy (AE), Specific coefficient (Acoef), Salinity coefficient (Kp), Optimum temperatura (Temp), Optimum pH (OptimumpH), Carbon minimum concentration (ConcMinCarbon), Nitrate minimum concentration (ConcMinNitrate), Ammonia minimum concentration (ConcMinAmonia), Phosphorous minimum concentration (ConcMinPF), Optimum phosphorous concentration (ConcOptPF), Optimum carbon concentration (ConcOptCarbon) and Optimum oxygen concentration (ConcOptO2).
- **Calculation of the microorganisms population:** Microorganisms C:N ratio (CN_RATIO), Microorganisms C:P ratio (CP_RATIO), C:Microorganisms ratio (POPULATION_CARBOON_RATIO), Microorganisms efficiency (CARBOON_EFICIENCY), Anaerobic microorganisms efficiency (NITROGEN_EFICIENCY) and Minimum population (MINIMUM_POPULATION).

Once all the necessary values are obtained by the code, it proceeds to calculate every transformation rate affecting the nutrients in each cell and it calculates the final transformation rate of each nutrient and thus, the final nutrient concentration. Due to the fact that not all the transformations are simulated explicitly, the calibration of the processes simulated by the Sediment Quality module becomes a really complex procedure.

Lately, it has been incorporated another method for simulating the **denitrification** process. This method consists on a simplification based on Peyrard et al., (2011) and it simulates the degradation of particulate organic carbon (POC), the degradation of dissolved organic carbon (DOC) and the N loss by the denitrification process itself. According to this methodology, POC and DOC degradation are calculated by first order kinetics in which the substrate concentration is directly linked to the degradation rate (Equations 2-66; 2-67). The denitrification, in contrast, is simulated by a Michaelis-Menten type equation, which is a combination of first and cero order kinetics equations, and is described by the Equation 2-68.

$$R_{POC} = -k_{POC} * [POC] \quad (2-66)$$

$$R_{DOC} = -k_{DOC} * [DOC] \quad (2-67)$$

$$R_{NO3} = -0.8 * \left(\rho \frac{1-\phi}{\phi} * k_{POC} * [POC] * \frac{10^6}{MC} + k_{DOC} * [DOC] \right) * \frac{[NO3]}{k_{NO3} * [NO3]} * T_{anaero} \quad (2-68)$$

Where:

R_{POC} is the degraded amount of POC ($mg\ g^{-1}\ d^{-1}$),

k_{POC} is the decay rate of POC (d^{-1}),

$[POC]$ is the concentration of POC ($mg\ g^{-1}$),

R_{DOC} is the degraded amount of DOC ($\mu M\ d^{-1}$),

k_{DOC} is the decay rate of DOC (d^{-1}),

$[DOC]$ is the concentration of DOC (μM),

R_{NO_3} is the degraded amount of nitrate ($\mu M\ d^{-1}$),

ρ is the density ($kg\ dm^{-3}$),

ϕ is the porosity ($cm^3\ cm^{-3}$),

M_C is the molecular weight of the carbon ($g\ mol^{-1}$),

K_{NO_3} is the half saturation of the nitrate (μM),

$[NO_3]$ is the concentration of NO_3 (μM)

T_{anaero} is the anaerobiose term (-).

The calculation of the anaerobiose term in the Equation 2-68, is defined by the Equation 2-69.

$$T_{anaero} = 0.000304 * \exp(0.0815 * \Theta_{rel} * 100) \quad (2-69)$$

Where:

T_{anaero} is the anaerobiose term (-),

θ_{rel} is the relative water content (-).

2.3.2. Evaluation of the results

To carry out a complete evaluation of the results, both graphical techniques and statistic analysis have been used. For this purpose, there have been employed the most widely used statistical indexes in hydrological studies (Gassman et al., 2007). In Moriasi et al., 2007 more information can be read.

- **Nash-Sutcliffe Efficiency (NSE)** (Nash y Sutcliffe, 1970; Equation 2-70): It determines the relative magnitude of the residual variance compared to the variance of the measured values. Thus, quantifys how well the simulated and observed data fit the line 1:1. This index ranges from $-\infty$ and 1, and although the positive values are acceptable, the best ones are those near to 1.

$$E_{NS} = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2}{\sum_{i=1}^n [(O_i - \bar{O})^2]} \right] \quad (2-70)$$

- **Determination coefficient (R^2)**, (Equation 2-71): It describes the ratio between the observed data variance to the simulated data. Its value ranges from 0 to 1, the values near 1 being the optimal ones.

$$R^2 = \frac{\left[\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})(O_i - \bar{P}) \right]^2}{\sum_{i=1}^n [(O_i - \bar{O})^2] \sum_{i=1}^n [(P_i - \bar{P})^2]} \quad (2-71)$$

- **PBIAS percentage** (Equation 2-72): It measures the tendency of the simulated data to be higher or lower than the observed one. The near its value is to 0, the better their relationship is. The positive and negative values indicate an overestimation and underestimation of the simulated data, respectively (Gupta et al., 1999).

$$PBIAS = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (O_i - P_i) * 100}{\sum_{i=1}^n (O_i)} \right] \quad (2-72)$$

- **Standar deviation ratio (RSR)** (Equation 2-73):. It represents the ratio of the Root Mean Square Error (RMSE) and the standard deviation of observed data. Its value ranges from 0 to a large positive value, with 0 being the optimal value.

$$RSR = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (O_i - P_i)^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2}} \quad (2-73)$$

Where:

O_i is the observed values on time i ,

P_i is the simulated values on time i ,

\bar{O} is the arithmetic mean of the observed values,

\bar{P} is the arithmetic mean of the simulated values.

The ENS , R^2 , PBIAS and RSR indexes have been calculated for the discharge, N load export and piezometric level during both calibration and validation periods. With regard to the discharge, the simulations are considered satisfactory when the ENS is higher than 0.36 (van Liew y Garbrecht, 2003), the R^2 higher than 0.5 (Green et al., 2006) and the PBIAS $\pm 25\%$ (Moriasi et al., 2007). With regard to the N load export, whereas the ENS and R^2 have been estimated as for the discharge evaluation, the PBIAS has been estimated satisfactory when $\pm 70\%$ (Moriasi et al., 2007).

2.3.3. Sensitivity analysis

A sensitivity analysis does not only allow the identification of the most sensible parameters, that is the parameters that most affect the results, but also can help identifying the limitations of the code.

Thus, when specific parameters are being tested above different variables, it is required these variables are sensible to the parameters being studied. Although in the literature exists a wide documentation related to the sensibility analysis carried out with several codes, there has not been performed any analysis of this type for the MOHID model yet. Even the results of this study are thought to be of help for other future studies carried out by the same code, it has to be noted that a sensitivity analysis is recommended during every study case, as the sensitivity of the parameters will change according to the characterization of both the model and the real system.

The sensitivity analysis can be of great help during the first modeling stages, in which the most sensible parameters are identified and then, their further calibration can be performed.

The problem involved in this kind of analysis lies in the evaluation itself, which is based on a set of parameters. Thus, although the change in the parameters is done one at a time, it has to be considered that the rest of the parameter's values will impact on the sensitivity analysis. However, this is something that has to be assumed when this kind of analysis are manually performed.

In the current study, the sensitivity of the parameters was analyzed since the first modeling steps; even so, the quantification of the change in different variables after changing the values of the parameters was performed after a satisfactorily calibrated model was obtained.

With the objective of performing this task, different parameters were selected and their values were individually changed so that the variation on the studied variables reflected the sensitivity of the model to the modified parameter (Chapra, 1997). According to the literature (Wallis et al., 2011) the values of the parameters were changed in 20%. Other authors, though, analyze the impact of the change by modifying the values in shorter ranges (Aguilar and Polo, 2005), something not possible in our case due to the long computational time needed by the model.

In the current study, the selected parameters for the sensitivity analysis are those which showed big impact on the results during the calibration process and they can be grouped into: (i) Hydrological parameters; or (ii) N cycle-related Parameters.

Hydrological Parameters

- Upper horizon's porosity (soil)
- Deeper horizon's porosity (aquifer)
- Upper horizon's saturated hydraulic conductivity (soil)
- Deeper horizon's saturated hydraulic conductivity (aquifer)
- Upper horizon's residual water content (soil)
- Deeper horizon's residual water content (aquifer)
- Hydraulic conductivity horizontal factor
- Manning coefficient for surface runoff
- Manning coefficient for channels
- Crop coefficient

N cycle-related Parameters

- Initial concentration of nitrate (N-NO₃) in the porous media
- Initial concentration of particulate organic carbon (POC) in the porous media
- Initial concentration of dissolved organic carbon (DOC) in the porous media
- Decay rate of particulate organic carbon (POC)
- Decay rate of dissolved organic carbon (DOC)
- Half saturation constant of nitrate (N-NO₃)

2.4. MODELIZACIÓN DE LA CUENCA DEL RÍO ALEGRIA

2.4.1. Set-up de los modelos SWAT y caracterización del sistema

El proceso de calibración y por lo tanto, los resultados de un modelo, están fuertemente influenciados por las variables estudiadas y los propios objetivos establecidos. La modelización en la presente Tesis Doctoral se ha llevado de una forma continua, siguiendo la evolución marcada por la consideración de distintos objetivos específicos. No obstante, con el propósito de exponer los resultados de una forma más clara, se han evidenciado diferentes etapas de trabajo.

La primera etapa consistió en la **modelización del impacto de las prácticas agrícolas**, la cual tenía como objetivo modelizar los cambios acontecidos en las prácticas agrícolas desde la década de los 80 hasta la actualidad (periodo 1986-2011) para estudiar la repercusión tanto sobre la exportación de agua y nutrientes como sobre el excedente de nutrientes en el sistema. Esta etapa concluyó con la publicación Epelde et al., (2015) (Anexo II). Posteriormente, se pudo comprobar que el ejecutable empleado hasta ese momento tenía un problema numérico al simular caudales eran inferiores a $1\text{E}-3 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$. Por ello, se procedió a actualizar el ejecutable (de SWAT-2009 a SWAT-2012) y los resultados del modelo se enfocaron a una comparación con respecto a los resultados del modelo físico.

La siguiente etapa de trabajo tenía como objetivo **simular el nivel freático mediante un modelo SWAT**. Para ello, y tras observar la dificultad de calibrar los parámetros hidrológicos manualmente manteniendo una simulación satisfactoria de otras variables, se empleó una herramienta de autocalibración.

En la tercera etapa de modelización, el objetivo fue estudiar la **representación de la variabilidad espacial** de un modelo SWAT para poder comparar la misma con los resultados obtenidos del modelo físico (apartado 4. *Simulación de procesos hidrológicos y de calidad mediante diferentes aproximaciones numéricas*).

En cualquier caso, los mapas empleados para la discretización espacial de la cuenca, definición de la red de drenaje, subcuencas y HRUs, son aquellos mostrados en la Figura 2-28. El modelo digital del terreno (LIDAR 2008), de una resolución de 5x5 m, fue descargado de la página web de Geoeuskadi (www.geo.euskadi.net). El mapa de suelos, corresponde a una digitalización del mapa de suelos de Álava (1:20000) desarrollado por Iñiguez et al., 1980. El mapa de usos del suelo, corresponde a los usos del año 2008 y fue facilitado por Neiker-Tecnalia.

Estos mapas fueron superpuestos para obtener una combinación de pendiente (el mapa de pendientes es reclasificado en tres clases: 0-5, 5-15 y >15%) suelo y uso, dejando el modelo dividido en 66 subcuencas y un total de 590 HRUs (Figura 2-29). La extensión media de las

subcuencas es de 0.8 km², estando en un rango de 0.1 a 2.3 km², y en un rango de 515-760 m en cuanto a su elevación se refiere.

Todos los modelos han sido caracterizados mediante la misma información meteorológica, propiedades edafológicas generales y características agronómicas. Se describe, a continuación, la información relacionada a estas características del modelo, la cual es leída por el código a través de unas tablas asociadas a los mapas mostrados anteriormente.

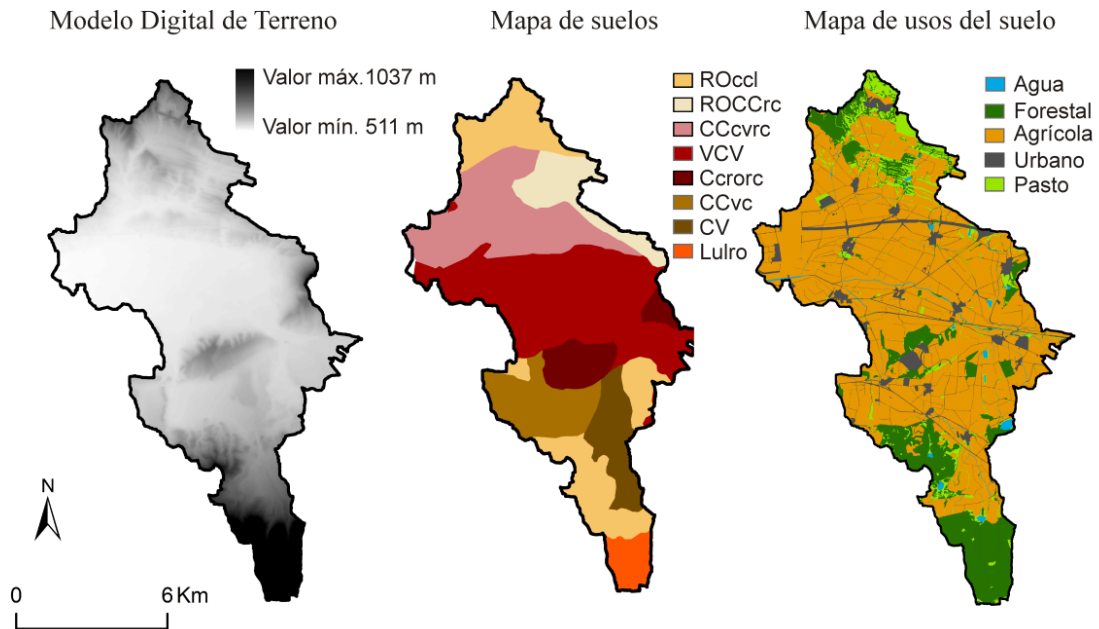


Figura 2-28. Mapas de entrada empleados por el código SWAT para establecer la discretización espacial del modelo. Los códigos de los suelos quedan definidos en la Tabla 2-8.

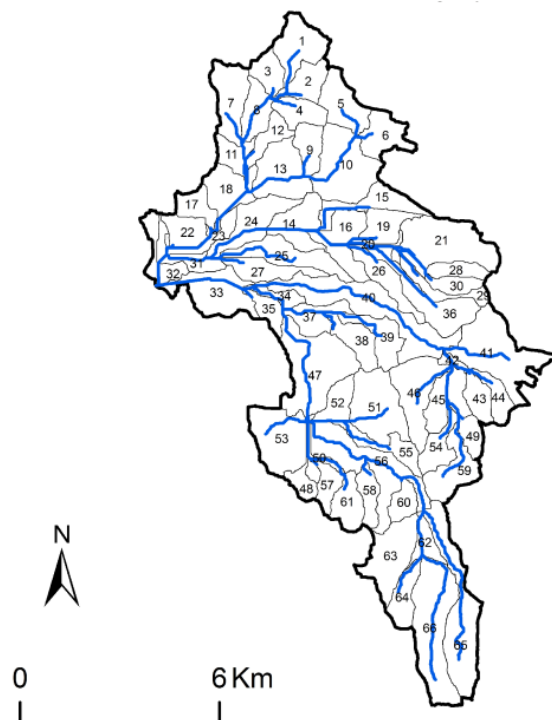


Figura 2-29. Definición de la red de drenaje y la división en subcuencas.

2.4.1.1. INFORMACIÓN METEOROLÓGICA

Los datos meteorológicos requeridos por el modelo SWAT, son datos diarios que, varían en función del método de evapotranspiración elegido. En el presente trabajo, dado que se han empleado dos métodos diferentes (apartado 2.4.2.1. *Calibración de los parámetros relacionados con los procesos hidrológicos*) se han necesitado datos diarios de radiación solar, temperatura mínima y máxima, humedad relativa y velocidad del viento de las estaciones Arkaute (C001), Alegria (C056) y Kapildui (C047). Esta información ha sido tomada de la página web de la Agencia de Meteorología (Euskalmet) del Gobierno Vasco (www.euskalmet.euskadi.net). Para el tratamiento de datos (definido en el apartado 2.2. *Tratamiento de datos*) también fueron necesarios los datos meteorológicos de la estación de Foronda, datos facilitados por la Agencia Estatal de meteorología.

2.4.1.2. INFORMACIÓN EDAFOLÓGICA

Tal y como hizo Cerro (2013) para cada tipo de suelo se calculó una fracción media en función de las analíticas de suelo facilitadas por el Departamento de Desarrollo Rural, Litoral y Alimentario del Gobierno Vasco. Así, a cada suelo se le asignó una determinada fracción de limo, arcilla y arena, y el resto de valores requeridos por SWAT (densidad aparente, cantidad hídrica disponible y conductividad saturada) fueron estimados para cada textura a través del programa Soil Water Characteristics (SWC) desarrollado por el Departamento de Agricultura de Estados Unidos (Saxton y Rawls, 2009) (Tabla 2-8).

Código	Descripción	Grupo	Arcilla (%)	Limo (%)	Arena (%)	Textura	Ks (m d ⁻¹)	ρ (g cm ⁻³)	AWC
Roccl	Rendzina Ochrica	C	29	51	19	Silty Clay Loam	0.17	1.35	0.17
ROCCrc	Rendzina Ochrica y Cambisol Cálculo	C	29	51	20	Silty Clay Loam	0.17	1.35	0.17
CCcvrc	Cambisol Cálculo	B	33	46	20	Silty Clay Loam	0.14	1.35	0.16
VCV	Vertisol y Cambisol Vértico	A	25	41	33	Loam	0.24	1.41	0.15
Cerorc	Cambisol	B	25	43	24	Silty Loam	0.22	1.38	0.17
CCvc	Cambisol Cálculo	A	23	39	38	Loam	0.29	1.43	0.14
CV	Cambisol Vértico	A	16	30	47	Loam	0.56	1.45	0.13
Lulro	Luvisol Orthico	D	30	40	30	Clay Loam	0.16	1.39	0.15

Tabla 2-8. Caracterización de los suelos (Ks: Conductividad hidráulica saturada ρ : Densidad aparente; y AWC: Contenido hídrico disponible).

2.4.1.3. INFORMACIÓN AGRONÓMICA

Ciclos de los cultivos

Basándose en la información presentada en el apartado 2.1.4. *Actividad agrícola*, se establecieron los siguientes ciclos de cultivos a considerar en el modelo:

- Trigo: 2-Nov/31-Jul
- Cebada de invierno: 2-Nov/31-Jul
- Cebada de primavera: 5-Feb/31-Jul
- Patata: 20-Abr/20-Oct
- Remolacha: 15-Feb/1-Nov

Rotación de los cultivos

En cuanto a la simulación de los usos del suelo se refiere, cabe destacar la consideración de dos cambios principales. Por un lado, el **cambio generalizado** de usos del suelo, el cual ha supuesto que una zona mayormente de regadío en los 80 (Arrate, 1997), esté considerada de mayoritariamente de secano desde los primeros años del s. XXI. (Martinez, 2008). Por otro, la **rotación** de cultivos en una misma parcela, práctica muy común en esta zona de la llanada alavesa.

Para simular estos cambios fue necesario establecer un itinerario técnico para cada HRU y año de simulación, en el que se especificó toda la gestión agrícola: fechas de siembra, fertilización, riego y cosecha. El hecho de que los itinerarios tengan que ser definidos para las HRUs y que éstas se hayan creado en base a un mapa de usos de suelo (Figura 2-30) en lugar de un mapa de gestión agrícola similar, trae consigo que la redistribución agrícola no sea tarea sencilla a la hora de definir la gestión agrícola en el modelo. Esto se debe al hecho de que distintas HRUs ocupadas por un determinado cultivo, según el mapa de usos del suelo, pueden estar siguiendo diferentes rotaciones considerando, por lo tanto, diferentes cultivos.

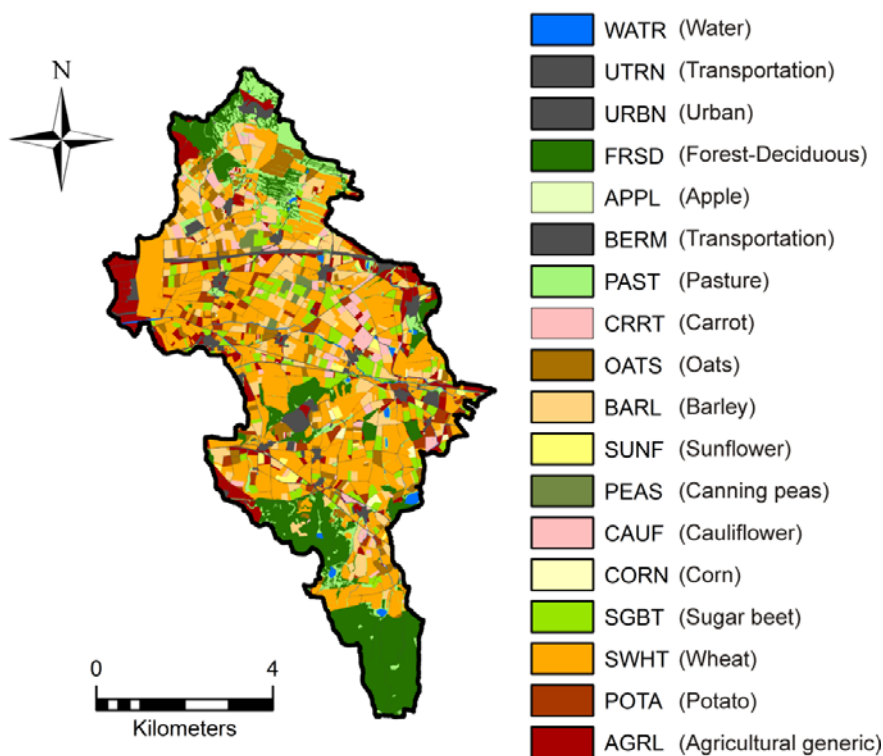


Figura 2-30. Uso de suelo correspondiente al año 2008.

Para establecer los usos en el modelo, se tuvieron que definir, por un lado, las rotaciones a considerar, y por otro, la ubicación de las mismas en el mapa introducido para la creación de las HRUs. Para llevar a cabo este proceso, se tuvo que definir un código a cada rotación considerada (Tabla 2-9). Así, cada código contempla las rotaciones más comunes, que constan de dos o tres cultivos y que en ocasiones suelen intercalar cultivos de regadío entre los cultivos de secano. Además, dependiendo del número de cultivos considerados en cada tipo de

rotación, ésta se desglosa en tantas rotaciones como cultivos considerados, con el fin de que la extensión ocupada por cada cultivo se mantuviese similar a lo largo del periodo simulado.

Se procedió, así, a la asignación de los códigos mostrados en la Tabla 2-9 a las HRUs (definidas como subcuenca, suelo, uso y pendiente a través de la interfaz) de tal manera que la ocupación en los años sucesivos se mantuviese lo más invariable posible. Si bien es cierto que los códigos se asignaron manualmente, esto se realizó siguiendo un criterio lógico y se asumió que es de mayor importancia la extensión ocupada por los cultivos según el mapa de la Figura 2-30 que la localización concreta de esos usos. Así, los códigos se asignaron a parcelas agrícolas (Tabla 2-10) y se consiguió una distribución de la extensión homogénea durante los años consecutivos.

Rotación	Código
Trigo/Cebada	R11
Cebada/trigo	R12
Cebada/Remolacha /Trigo	R21
Remolacha /Trigo/Cebada	R22
Trigo/Cebada/Remolacha	R23
Cebada/Patata/Trigo	R31
Patata /Trigo/Cebada	R32
Trigo/Cebada/ Patata	R33
Trigo/Barbecho	R4
Remolacha /Trigo	R61
Trigo/Remolacha	R62

Tabla 2-9. Rotaciones consideradas por el modelo SWAT.

Código	Subcuenca	HRU			Extensión (Km ²)
		Uso	Suelo	Pendiente	
R11	1,2,9,10,...	SWHT	Indiferente	Indiferente	4.9
R12	3,4,11,12...	SWHT	Indiferente	Indiferente	3.2
R21	1,2,3,10,11,12..	SGBT	Indiferente	Indiferente	0.8
R22	4,5,6,13,14,15...	SGBT	Indiferente	Indiferente	1.0
R23	7,8,9,16,17,18...	SGBT	Indiferente	Indiferente	1.1
R31	1-39	POTA	Indiferente	Indiferente	0.4
R32	40-43	POTA	Indiferente	Indiferente	0.4
R33	44-66	POTA	Indiferente	Indiferente	0.4
R31	1,2,3,10,11,12..	BARL, OATS, CAUF y CRRT	Indiferente	Indiferente	3.0
R32	4,5,6,13,14,15...	BARL, OATS, CAUF y CRRT	Indiferente	Indiferente	3.0
R33	7,8,9,16,17,18...	BARL, OATS, CAUF y CRRT	Indiferente	Indiferente	3.2
R4	Indiferente	AGRL, SUNF, CORN y PEAS	Indiferente	Indiferente	5.3
R61	5,6,13,14....	SWHT	Indiferente	Indiferente	5.8
R62	7,8,15,16...	SWHT	Indiferente	Indiferente	5.2
Agua	Indiferente	WATR	Indiferente	Indiferente	0.4
Urbano	Indiferente	URBN, UTRN Y BERM	Indiferente	Indiferente	3.2
Transporte	Indiferente				
Bosque	Indiferente	FRSD	Indiferente	Indiferente	9.2
Pasto	Indiferente	PAST	Indiferente	Indiferente	3.5

Tabla 2-10. Asignación de los códigos de las rotaciones a las HRUs agrícolas del modelo. Los códigos "Uso" quedan definidos en la Figura 2-30.

El cálculo de la extensión se realizó de forma manual considerando tres años consecutivos, dado que las rotaciones consideraban como máximo, una duración de tres años (Tabla 2-11).

Uso		Año 1	Año 2	Año 3
Parcelas agrícolas	Trigo	14.8	18	14.3
	Bosque	9.2	9.2	9.2
	Cebada	7.4	9.6	7.6
	Remolacha	6.8	6	6.9
	Barbecho	4.6	-	4.6
	Patata	3.4	3.4	3.6
Otros	Pasto	3.4	3.4	3.4
	Urbano-Transporte	3.5	3.5	3.5
	Agua	0.4	0.4	0.4
	Ext. Total (km²)	53.5	53.5	53.5

Tabla 2-11. Extensión (km²) simulada durante los años consecutivos a partir del año 2000.

Una vez se consiguió simular esta distribución homogénea, se procedió al intercambio de los cultivos de secano por los de regadío durante los primeros años de simulación con el objetivo de obtener la distribución mostrada en la Figura 2-31. En esta figura se muestra la evolución simulada de la ocupación de los usos del suelo, en la que, como puede observarse, durante los primeros años de simulación (1986-1999) los cultivos mayoritarios son los de regadío (patata y remolacha) y durante un posterior periodo se observa un cambio gradual hacia el incremento de las parcelas con cereal (avena y trigo). Durante los últimos años de simulación, 2000-2011, la ocupación del suelo se ha mantenido bastante similar, siendo los cereales los cultivos predominantes y siendo la extensión de la remolacha ligeramente superior a la de la patata, tal y como acontece en la realidad (Martinez, 2008). En la Figura 2-32 se muestran las rotaciones consideradas en el modelo así como las principales prácticas llevadas a cabo.

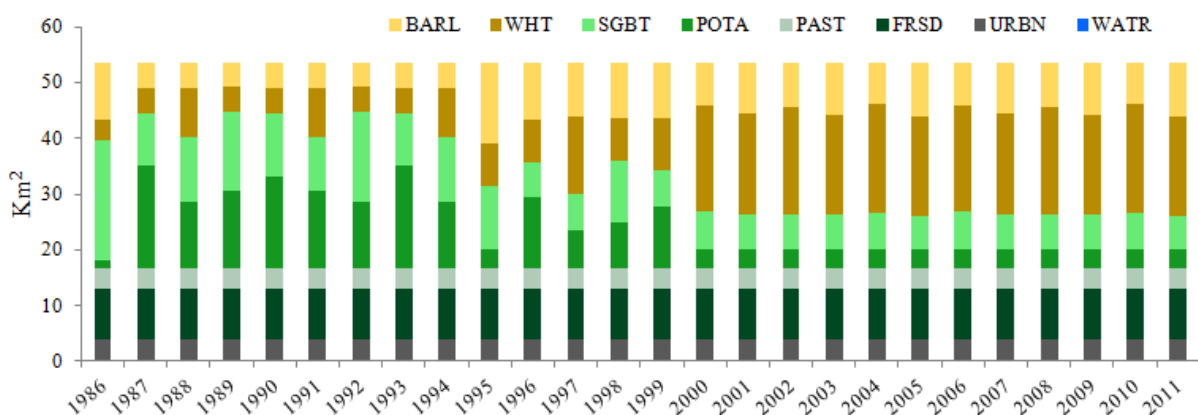


Figura 2-31. Distribución de los usos del suelo durante los años de simulación. Los códigos correspondientes a los usos quedan definidos en la Figura 2-30. A partir del año 2000 la extensión sigue la evolución definida en la Tabla 2-11.

En este punto, es conveniente destacar que con el propósito de simplificar la rotación de cultivos, la avena y cebada han sido consideradas de la misma forma debido a las características

comunes entre los dos cultivos (propiedades fisiológicas e itinerarios). Por lo que de aquí en adelante, al tratar la cebada, se estará considerando el grupo formado por ambos cultivos.

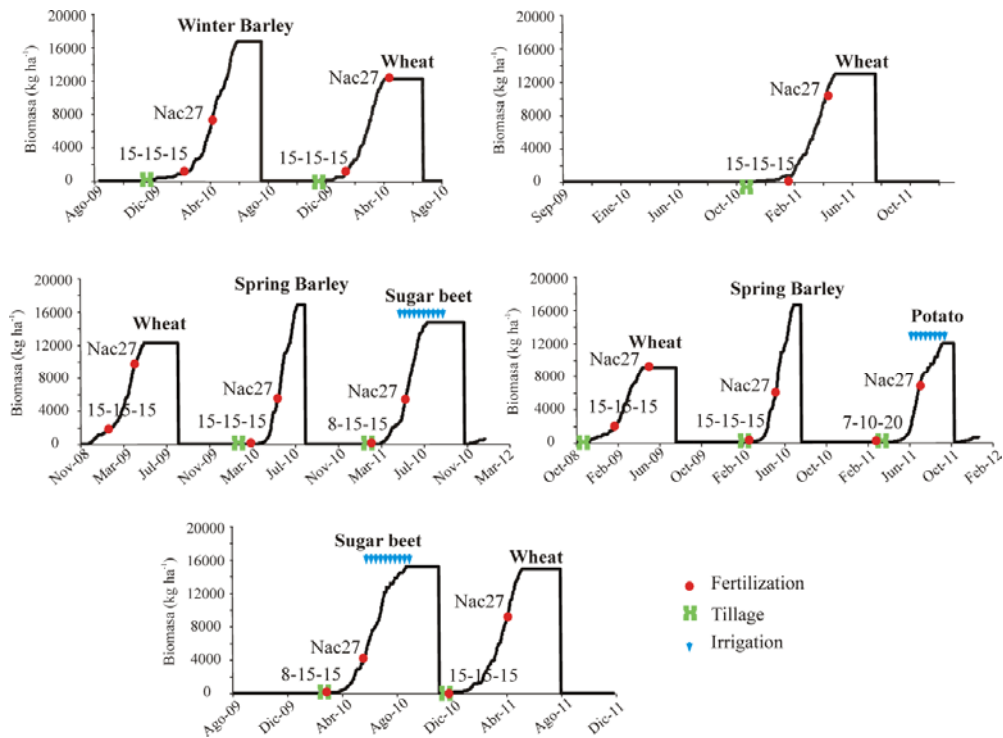


Figura 2-32. Rotaciones y principales prácticas agrícolas consideradas en el modelo.

Fertilización

En el modelo se consideró el descenso en el uso de fertilizantes según los datos facilitados por Neiker. Según estos datos, se registró un descenso escalonado, el cual divide el periodo 1986-2011 en cuatro periodos diferentes: 1986-1989, 1990-1999, 2000-2008 y 2009-2011.

La fertilización de la **cebada**, cultivo que menor cantidad de fertilizante requiere, fue cuantificada (fondo y cobertera) en 255, 210 y 160 Kg N ha⁻¹ durante los periodos 1986-1989, 1990-1999 y 2000-2011, respectivamente. La fertilización del **trigo**, en 300, 250 y 200 Kg N ha⁻¹ durante los periodos 1986-1989, 1990-1999 y 2000-2011, respectivamente. La de la **patata**, en 330, 290 y 230 durante los periodos 1986-1989, 1990-1999 y 2000-2011, respectivamente. Por último, la fertilización de la **remolacha**, fue cuantificada en 320, 275, 220 y 155 durante los periodos 1986-1989, 1990-1999, 2000-2008 y 2009-2011, respectivamente. En la Figura 2-33 se muestran las dosis de fertilización aplicadas en fondo y cobertera a cada uno de los cultivos durante los distintos periodos de la simulación.

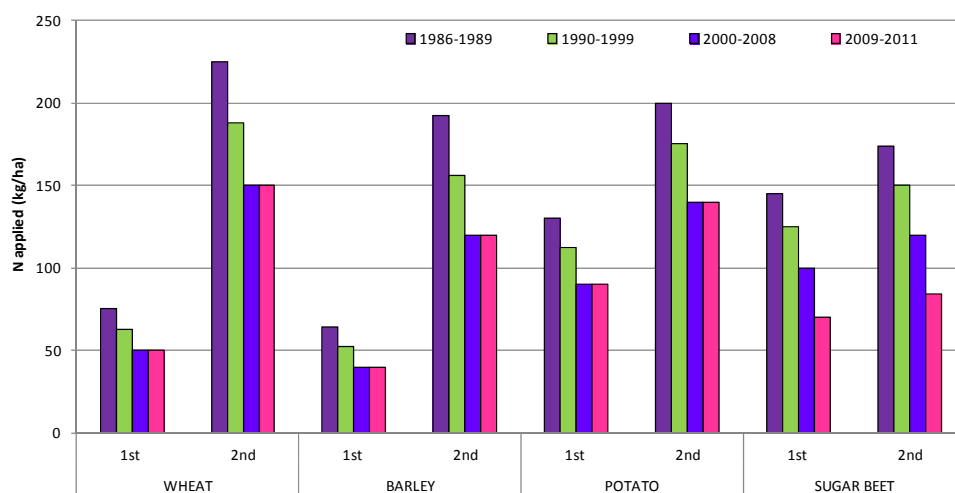


Figura 2-33. Dosis de fertilizante aplicada en fondo y cobertera a cada cultivo durante los cuatro periodos de fertilización.

Riego

En la cuenca del río Alegria se dio un cambio importante durante los últimos años de la década de los 90 y principios de 00 en relación a la procedencia del agua empleada para el regadío. Con el objetivo de incorporar este cambio en el modelo, se consideró que en el año 2000 el origen de esta agua pasaba de ser subterránea a superficial. Esto puede simularse fácilmente mediante SWAT, ya que a la hora de definir la práctica de riego, permite escoger la fuente de agua empleada para tal fin. Así, mientras que para el periodo 1986-1999 el origen se definió como una subcuenca situada en la parte central de la cuenca, para el periodo 2000-2011 fue definido como una entrada de agua adicional. No obstante, hay que considerar que durante este periodo la extensión ocupada por cultivos de regadío había disminuido considerablemente (ocupando, como máximo, 10.5 km² de una extensión total de 53.5 km²), por lo que el efecto sobre el balance hídrico global se estima bajo y, por lo tanto, totalmente aceptable.

En lo que a la cantidad de riego se refiere, a través de comunicaciones personales se conoce que ésta puede estar en torno a los 120 mm anuales estando distribuidos en diferentes dosis a lo largo del periodo estival. Para que el modelo no considerase la entrada de estas dosis simultáneamente en cada HRU con cultivos de riego, se procedió a dividir la cantidad total en dosis de 10 mm y a su aplicación de forma distribuida tanto temporal como espacialmente.

Además, para simular la recirculación de nitratos producida por la aplicación de agua de riego procedente del acuífero y, por lo tanto, con una concentración de nitratos determinada, debido a que el código SWAT no considera ninguna concentración de nutrientes en el agua que extrae de esta fuente, se tuvo que simular una entrada de N adicional cada vez que se aplicaba una dosis de riego.

Así, se tuvo que calcular la cantidad equivalente de N aportado en cada dosis de riego de 10 mm. Para ello, se consideró la concentración media de nitratos en el pozo de Arkaute a partir de datos obtenidos de la página web de URA (Tabla 2-12) y se obtuvo una cantidad de N la cual era aplicada en forma de N mineral a la vez que se aplicaba cada dosis de riego (Tabla 2-12).

Año	Concentración NO ₃ (mg l ⁻¹)	Fertilización equivalente (Kg N ha ⁻¹)
1986	20	0.45
1987	20	0.45
1988	20	0.45
1989	20	0.45
1990	50	1.13
1991	105	2.38
1992	127	2.87
1993	156	3.53
1994	167	3.78
1995	120	2.71
1996	100	2.26
1997	80	1.81
1998	66	1.49
1999	40	0.91

Tabla 2-12. Concentración (mg NO₃ l⁻¹) anual considerada para el agua subterránea y la fertilización (kg N ha⁻¹) equivalente a 10 mm de riego.

2.4.1.4. CONDICIONES INICIALES

El modelo es caracterizado mediante una serie de valores que representan las condiciones iniciales de agua y nutrientes en el sistema.

El **volumen de agua inicial** se define mediante los parámetros **FFCB** y **SHALLST**. Mientras que el primero define la fracción entre el contenido hídrico de capa de suelo con respecto al volumen de agua en condiciones de capacidad de campo, el segundo define la lámina de agua inicial del acuífero somero. Los valores empleados para su caracterización se muestran en la Tabla 2-13.

Parámetro	Descripción	Valor Calibrado	Unidades
FFCB	Fracción entre el contenido hídrico de una celda y el volumen de agua en condiciones de capacidad de campo	0.8	-
SHALLST	Volumen de agua inicial del acuífero somero	3000	mm
SOL_NO3	Concentración de nitrato en las capas de suelo	5	mg N kg ₁ ⁻¹
RSDIN	Concentración de residuo vegetal en los 10 mm superficiales del suelo	0	kg N ha ⁻¹
SOL_CBN	Concentración de carbono en las capas de suelo	Varía en función del modelo	(%)
SHALLST_N	Concentración de nitrato en el acuífero somero	15	mg N l ⁻¹

Tabla 2-13. Valores iniciales establecidos en los modelos SWAT.

Existen diferentes parámetros con los que establecer los **valores iniciales de los nutrientes**. En concreto, debido a que en el presente trabajo no se ha limitado el crecimiento de la vegetación en función del estrés producido por la falta de fósforo ni tampoco se ha simulado su transporte, de aquí en adelante el único nutriente al que se hace referencia es el nitrógeno. Así, en el suelo, puede definirse la concentración de nitratos mediante el parámetro **SOL_NO3** (mg N kg⁻¹) y la concentración de residuo vegetal en los 10 mm superficiales del suelo mediante el parámetro **RSDIN** (kg N ha⁻¹).

Los reservorios que componen las sustancias húmicas (N orgánico Activo y N orgánico Estable) son inicializados en base a la relación C:N igual a 14:1 obtenida de la cantidad de carbono establecida mediante el parámetro **SOL_CBN** (%). El reservorio de amonio es inicializado con un valor de 0 mg kg⁻¹. En el acuífero, el valor de nitratos en disolución es establecido mediante el parámetro **SHALLST_N** (mg N l⁻¹). Los valores asignados a estos parámetros se presentan en la Tabla 2-13.

2.4.2. Calibración de los modelos SWAT

La calibración de los modelos SWAT, así como la calibración de todos los modelos de transporte a nivel de cuenca, requiere la calibración independiente de los procesos hidrológicos, para poder posteriormente ajustar aquellos procesos que afectan tanto al transporte como a la transformación de nutrientes. Este proceso se basó en la modificación de diferentes parámetros con el fin de ajustar los valores simulados a los valores observados.

Es importante destacar que la rapidez de ejecución del modelo agiliza en gran medida el proceso de calibración. En efecto, el ordenador de trabajo ha requerido en torno a siete minutos para simular 26 años a paso diario un total de 590 HRUs distribuidas en 53 km².

A continuación, se describen los parámetros modificados en cada modelo mencionado en el apartado 2.4.1. *Set-up de los modelos SWAT y caracterización del sistema* durante el proceso de calibración.

2.4.2.1. CALIBRACIÓN DE LOS PARÁMETROS RELACIONADOS CON LOS PROCESOS HIDROLÓGICOS

Modelización del impacto de las prácticas agrícolas

La calibración hidrológica del primer modelo se basó en un modelo inicial desarrollado por Cerro (2013) y se realizó para el periodo 21-Oct-2009/31-Dic-2010. Un análisis de sensibilidad realizado mediante la interfaz de SWAT permitió durante esta etapa identificar los parámetros más sensibles en cuanto a la exportación de agua se refiere, y así, se llevó a cabo la calibración de los mismos apoyada fundamentalmente en la comparación gráfica y en los análisis estadísticos de los resultados. El análisis de sensibilidad de SWAT combina el método de *Latin Hypercube* con *One Factor At a Time* (Veith y Ghebremichael, 2009). Concretamente, los análisis estadísticos se centraron en la cuantificación del rendimiento de la simulación del caudal; no obstante, otros aspectos, como el balance global de agua y el alcance de los picos durante las crecidas y su recesión, también fueron estudiados.

Uno de los aspectos que fueron modificados con respecto al modelo inicial, y de gran importancia en lo que a este estudio se refiere, fue la ocupación de los suelos, ya que en un principio se asumió constante la distribución de la vegetación (empleando la situación actual para todo el periodo 1986-2011), pero posteriormente se pensó que era necesario contemplar en el modelo el cambio temporal de los cultivos mencionado en el apartado anterior, ya que uno de los objetivos de la modelización era estudiar las implicaciones de los cambios acontecidos en relación a las prácticas agrícolas. En este modelo, se conceptualizó el sistema con suelos de 5 m

de profundidad (tal y como hicieron Jégo et al., 2008 en la misma zona de estudio) en la zona central de la cuenca y suelos de menor espesor (0.5-2 m) en las partes exteriores.

La calibración durante esta etapa se llevó a cabo de forma manual, con la excepción del parámetro **CN2**, número de curva, el cual fue ajustado a través de la herramienta de autocalibración incorporada en la interfaz del SWAT. Esta herramienta permite variar un porcentaje determinado el valor inicial establecido, el cual se asigna en base al uso y grupo hidrológico, con el fin de hallar el óptimo valor inicial con el que más se ajusta el caudal a los datos observados (Tabla 2-14).

Parámetro	Descripción	Rango	Valor Calibrado	Unidades
Basin (*.bsn)				
SFTMP	Temperatura de precipitación en forma de nieve	-5-5	1	°C
SMTMP	Temperatura de fusión	-5-5	2	°C
SMFMX	Máxima tasa de fusión	0-10	4.5	mm °C ⁻¹
ESCO	Factor de compensación de evaporación	0.01-1	0.9	-
SURLAG	Coefficiente de retardo de la escorrentía	1-24	5	-
Groundwater (*.gw)				
GW_DELAY	Tiempo de retardo del agua subterránea	0-500	0.5	d
ALPHA_BF	Factor alpha de recesión	0-1	0.35	-
GW_REVAP	Coefficiente de "revap" del agua subterránea	0.02-0.2	0.02	-
REVAPMN	Rango de agua a partir de la cual el agua subterránea sufre el proceso de revap	0-5000	2000	mm
GWQMIN	Rango de agua a partir de la cual el agua subterránea es dirigida a los canales	0-5000	800	mm
RCHRG_DP	Recarga del acuífero profundo	0-1	0	-
HRU (*.hru)				
OV_N	Coefficiente de Manning de la superficie	0.01-0.5	0.14	-
LAT_TTIME	Tiempo para el flujo lateral		5	d
Routing (*.Rte)				
CH_N2	Coefficiente de Manning de los canales	0.01-0.5	0.01	-
Management (*.mgt)				
CN2	Valor de CN inicial	35-98	Autocalibrado	-

Tabla 2-14. Descripción y valores calibrados de los parámetros hidrológicos.

El resto de los parámetros se fueron ajustando progresivamente, como se ha mencionado anteriormente, estudiando el balance hídrico global y el hidrograma simulado. En la Tabla 2-14 se muestran los valores de los parámetros empleados en el primer modelo. Por ejemplo, para ajustar el balance global y simular una evapotranspiración realista, se ajustaron los parámetros **ESCO** y **EPCO**, los cuales permiten que el modelo pueda satisfacer la demanda evaporativa o de transpiración mediante la compensación con el agua de las capas más profundas. Se observó que, generalmente, su efecto más notorio se da durante las crecidas, en las que cuanto mayor es el valor de estos parámetros, menor caudal es simulado. Otro parámetro con relación a la evapotranspiración es el **REVAPMN**. Este parámetro representa un

movimiento de agua desde el acuífero hasta los suelos, con lo que se puede simular un aporte de agua a los suelos que permita satisfacer la demanda evaporativa o de transpiración. En el presente estudio el valor de este parámetro se dejó suficientemente alto para que el proceso de “revap” fuese realmente bajo, pues con los parámetros ESCO y EPCO calibrados ya se estaba simulando una evapotranspiración realista.

En el modelo han sido identificados fundamentalmente tres parámetros que condicionan el caudal de base del hidrograma. Estos son, por un lado, el **ALPHA_BF**, constante de recesión, el cual es un índice de la respuesta del caudal subterráneo frente a cambios en la recarga (Smedema y Rycroft, 1983). Cuanto menor es su valor menores son los picos de caudal simulados y mayor el caudal de base. A pesar de que se observó que con valores más altos al empleado (0.35) se obtiene un mejor ajuste del hidrograma, el hecho de que en Cerro (2013) se haya estimado un valor para la misma cuenca de estudio basado en datos de campo, hizo que se estimase oportuno dejar ese mismo valor sin ser sujeto a calibración. Por otro lado, está el **GWQMN**, el cual indica el contenido de agua necesario para que el acuífero somero dé agua a los ríos. Se observó que a partir de cierto valor, valor por encima del contenido de agua del reservorio “acuífero somero”, su valor no tiene impacto sobre el hidrograma. Básicamente, este parámetro afecta a los picos, los cuales muestran un valor mayor cuanto menor es el valor de GWQMN. Por último, está el parámetro **GW_DELAY**, el cual es representativo del tiempo necesario desde que el agua sale del suelo por infiltración hacia las zonas más profundas y llega al acuífero somero tras atravesar la zona vadosa. Un aumento de su valor trae las características “panzas” seguidas a los picos en el hidrograma.

El parámetro **SURLAG** es el que condiciona el flujo lateral. No obstante, en la cuenca del río Alegria este tipo de flujo no se cree de gran importancia, por lo que su valor ha sido calibrado considerando los valores simulados por el modelo.

A pesar de que todos los parámetros citados pueden asignarse para cada HRU, suele ser muy habitual mantenerlos constantes en toda la extensión de la cuenca. Esto suele ser generalmente debido a que su obtención se realiza a través de su calibración mediante la comparación de los datos observados y simulados, ya que, al no ser parámetros físicos, el origen de sus valores no está muy claro (Macalister, 2010).

El parámetro **SHALLST** es el que define el volumen de agua inicial en el acuífero somero. Si bien es uno de los pocos parámetros del modelo que puede ser caracterizado con valores medidos en campo, su estimación suele realizarse muy aproximadamente. Tal y como sugiere el manual de SWAT, el hecho de emplear como mínimo un año de calentamiento o *warm up*, es suficiente para que la influencia de su valor no se perciba en el modelo (manual SWAT; Macalister, 2010). Sin embargo, en este estudio se ha comprobado que esto no es así y que su valor tiene un gran impacto sobre la simulación del volumen de agua en el acuífero somero, sin afectar, prácticamente, al agua contribuida al río y, por lo tanto, al hidrograma simulado.

Así, el volumen de agua simulado en el acuífero somero, descendía progresiva y lentamente al emplear valores de SHALLST en torno a 5000 y 6000 mm, y al descender el valor a 2000 o 3000 mm, el volumen simulado se mantenía prácticamente estabilizado en el valor establecido en SHALLST, con variaciones de volumen prácticamente inapreciables (<10 mm).

En todos los casos, lo que ocurre es que el volumen simulado es superior al valor establecido en GWQMN, el cual es el valor mínimo para que el acuífero descargue en el río. Siendo así, el modelo reconoce que hay descarga del acuífero somero, y su valor depende de los parámetros GW_DELAY y ALPHA_BF.

En lo que al método de evapotranspiración se refiere, hay que destacar que a pesar de que en un principio se optó por el método de Penman-Monteith, tras realizarse una simulación de 26 años de duración (1986-2011) se comprobó que la cantidad de ET anual simulada era muy baja comparándola con datos de la bibliografía, por lo que se estableció el método de Hargreaves para su obtención. Así, se consiguió que la pérdida por evapotranspiración anual representase el 64% de la precipitación, mientras que a través de Penman-Monteith ésta estaba cuantificada en 43%.

Tras cambiar el ejecutable debido al problema numérico citado anteriormente, se comprobó que la exportación de agua y carga de nitrógeno, así como las transformaciones entre los diferentes reservorios que componen su ciclo, estaban siendo simuladas satisfactoriamente, por lo que no fue necesario volver a calibrar el modelo.

Modelización del nivel freático

Dado que el modelo SWAT no es físico, éste no simula la altura del nivel y en su lugar, simula un volumen de agua almacenado en el compartimento denominado “acuífero” y su respectiva variación a lo largo del tiempo de simulación. Así, para calibrar el nivel freático medido en campo es necesario modificar el volumen de agua simulado en base a la porosidad del medio. Con esto, se obtiene una simulación de la variación de nivel, a la cual debe asignarse una altitud para que pueda ser comparada a niveles medidos.

A pesar de que estén identificados los parámetros que controlan esta variación de volumen, relación entre SHALLST y GWQMN, GW_DELAY y ALPHA_BF, la calibración manual enfocada simultáneamente al nivel freático y al caudal resulta realmente difícil. Por este motivo, se optó por emplear una herramienta de autocalibración creada por el Dr. Cyril Garneau de la Université Fédérale Toulouse Midi-Pyrénées (comunicación personal) que estuviese enfocada a variables como la variación del nivel freático y el caudal. Para ello, como se ha mencionado en el apartado 1.3.1.3. *Protocolo de modelización*, fue necesario establecer los parámetros a calibrar, su rango aceptable de valores de acuerdo con la literatura, el criterio de optimización, la función objetivo y las variables en las que se va a medir el rendimiento de la calibración. En la Tabla 2-15 se presentan los rangos aceptables para los parámetros a calibrar. La función objetivo en este caso, ha sido RMSE.

Parámetro	Archivo	Límite inferior	Límite superior	Unidades
KSAT	.sol	1	100	mm h ⁻¹
GW_DELAY	.gw	0.1	60	d
ALPHA_BF	.gw	0.01	0.5	d
GW_REVAP	.gw	0	1	-
REVAPMN	.gw	1000	8000	mm
GWQMN	.gw	500	6000	mm

Tabla 2-15. Parámetros considerados durante la autocalibración y los rangos de los valores.

Con estas condiciones, se llevaron a cabo tres procesos de autocalibración diferentes, en los cuales difería la variable simulada empleada para la verificación de los resultados. Las variables fueron: el caudal en el punto de salida, el nivel freático en un HRU cercano a la localización en la que se tomaron los datos de campo y la combinación de ambas. La Tabla 2-16 muestra los valores asignados a cada parámetro según la variable considerada en el proceso de calibración.

Parámetro	Nivel freático	Caudal	Ambas
KSAT	15.9	44.16	60.86
GW_DELAY	0.13	0.10	0.15
ALPHA_BF	0.31	0.34	0.41
GW_REVAP	0.27	0.98	0.07
REVAPMN	1991.30	4558.00	2182.20
GWQMN	4199.70	2143.40	4278.00

Tabla 2-16. Valores de los parámetros obtenidos por autocalibración.

Hay que considerar que para comparar los valores de nivel freático simulados con respecto a los observados, fue necesario convertir los datos de nivel a altura de agua equivalente, para lo que se empleó un valor de porosidad de 5%. Este valor se estimó mediante un modelo previo, tras comprobar que únicamente con un valor así se conseguía la fluctuación necesaria. Se observó que aumentando el valor del parámetro ALPHA_BF también se mejoraba considerablemente la fluctuación, no obstante, su valor se alejaba en gran medida de los datos reportados en la literatura. Así, a pesar de que se piensa que el valor de la porosidad empleado resulta pequeño comparándolo con valores en torno a 20-25% para las arenas y gravas (Custodio y Llamas, 1983), éste sigue estando dentro de los rangos medidos en la zona de estudio 0.3-20% (Arrate, 1997).

Representación de la variabilidad espacial

Por último, el cuarto modelo se centró en la calibración de la distribución espacial del proceso de desnitrificación. Si bien es cierto que los cambios realizados en este punto están relacionados con los parámetros que controlan el ciclo del nitrógeno, con el objetivo de obtener una mejor representación del proceso mencionado, se disminuyó el espesor de los suelos. Así, los suelos de la parte central de la cuenca fueron definidos con espesores de 1.5 m y los de las partes exteriores con espesores de 1 m. A pesar de que este cambio tuvo cierta repercusión sobre el balance hídrico y el hidrograma simulado, según los índices estadísticos la simulación seguía siendo satisfactoria, por lo que no requirió una nueva calibración de los parámetros hidrológicos.

2.4.2.2. CALIBRACION DE LOS PARÁMETROS RELACIONADOS CON LA CALIDAD DEL AGUA

Modelización del impacto de las prácticas agrícolas

Una vez los procesos hidrológicos son satisfactoriamente simulados, se procede a calibrar los parámetros que condicionan el flujo y la transformación de los nutrientes. La exportación de nitrógeno se calibró con el periodo 28-Oct-2009/27-Oct-2010 durante las tres

primeras etapas del trabajo y con 28-Oct-2009/31-Ago-2010 durante la cuarta con el objetivo de que el periodo de validación fuese similar en cuanto a las condiciones hídricas que el de calibración.

La calibración de los parámetros de calidad durante la primera etapa se centró en dos aspectos fundamentalmente. Por un lado, en la carga exportada de nitrógeno a través del punto de salida o *outlet*, y, por otro, en la cuantificación de los procesos que gobiernan el ciclo del nitrógeno. Hay que destacar, que en la literatura existe información detallada relacionada con estos procesos, así como desnitrificación, mineralización o volatilización a una escala pequeña (de parcela), pero que no es tan abundante la información que hay para escalas mayores, como son las cuencas hidrográficas.

Además, a este tipo de escala la cuantificación de los procesos puede variar significativamente, pues el hecho de que las cuencas no tengan una dedicación total a la agricultura hace que la cuantía de cada proceso pueda variar en mayor o menor medida. Concretamente, como la cuenca de este estudio tiene un uso agrícola casi en su totalidad (37 km² de una extensión total de 53.5 km²), no se espera que las diferencias entre los flujos a nivel de cuenca y a nivel de extensión agrícola sean muy diferentes; no obstante, la calibración de los parámetros que regulan estos procesos se estudió tanto a nivel de cuenca como a nivel de extensión agrícola.

Así, se procedió a calibrar los parámetros que condicionan la desnitrificación (**CDN** y **SDNCO**) y la mineralización (**CMN** y **RSDCO**) mediante los valores calculados para la extensión agrícola, y una vez obtenidas tasas aceptables, se continuó con el ajuste de parámetros como **EPCO** y **NPERCO** (Tabla 2-17). Parámetros ajustados en base a la exportación de nitrógeno simulada.

Parámetro	Descripción	Rango	Valor Calibrado	Unidades
Basin (*.bsn)				
EPCO	Factor de compensación de absorción de nutrientes	0.01-1	1	-
CDN	Coefficiente de la tasa de desnitrificación	0-3	0.1	-
SDNCO	Rango de contenido hídrico para la desnitrificación	0-1	0.95	-
CMN	Coefficiente de la tasa de mineralización del reservorio Activo	0.0001-0.003	0.002	-
RSDCO	Coefficiente de la tasa de descomposición del Residuo	0.01-0.1	0.01	-
NPERCO	Coefficiente de percolación del nitrógeno	0.01-1	0.8	-
Groundwater (*.gw)				
HLIFE_NGW	Edad media del nitrógeno en el acuífero somero	0-10	2500	d

Tabla 2-17. Descripción y valores calibrados de los parámetros relacionados con el nitrógeno.

Una vez calibrados los parámetros que gobiernan los flujos de transformación entre los distintos reservorios se procedió a calibrar el parámetro **HLIFE_NGW**. Este parámetro, es un parámetro opcional en el modelo pero de gran influencia sobre los resultados. Si bien es cierto

que en la mayoría de estudios emplean valores inferiores a 4 días (Cho et al., 2010a; Cho et al., 2010b; Glavan y Pintar, 2012), estando en muchos casos obtenidos mediante procesos de autocalibración, únicamente se ha encontrado una publicación en la que se hace una crítica a los valores empleados que, siendo tan bajos, simulan un consumo de nitrato en el acuífero realmente alto (Sels, 2009).

En el presente estudio se calibró el parámetro HLIFE_NGW después de verificar que los flujos de transformación de N estaban dentro de los rangos aceptables. Su valor se calibró mediante el ajuste de la exportación de carga simulada con respecto a los valores observados y se comprobó que eran necesarios valores superiores a 2000 para que la pérdida de nitrógeno fuese prácticamente inapreciable. En cuanto al valor del carbono orgánico inicial en los suelos, como simplificación, se asignó un valor de 0.5% constante para todos los suelos.

El cambio del ejecutable no requirió la calibración de los parámetros relacionados con la calidad de las aguas, pues tanto los flujos de nitrógeno como la exportación de carga de N seguían estando bien caracterizados una vez cambiado el ejecutable.

Modelización del nivel freático

En la etapa en la que se empleó la herramienta de autocalibración, no se modificaron los parámetros relacionados con la calidad del agua, ya que al comprobar que el caudal simulado empeoraba considerablemente con respecto a la simulación anterior, se optó por no considerar el proyecto para una investigación más detallada, quedando así, descartado de un estudio más exhaustivo.

Representación de la variabilidad espacial

Por último, en la última etapa, enfocada a la simulación de la distribución espacial de la desnitrificación, además del cambio del espesor de los suelos ya mencionado en el apartado anterior, también se estudiaron detalladamente dos aspectos con el objetivo de obtener una mejor representación de la desnitrificación:

- Distribución vertical del carbono.
- Coeficiente de la tasa de desnitrificación (CDN) y el rango de contenido hídrico para la desnitrificación (SDNCO).

De forma simplificada y de acuerdo con Muñoz (2012), en los suelos se definió un contenido variable de carbono orgánico, el cual disminuía de 0.85% en la parte más superficial (0-0.6 m de profundidad) a 0.44% en la parte más profunda (profundidad comprendida entre 0.6 y 1 m).

De los parámetros mencionados en relación a la desnitrificación, finalmente sólo se modificó el valor de SDNCO, al que se le aumentó el valor a 1 para que la desnitrificación ocurriese a partir del contenido en capacidad de campo.

2.4.3. Set-up del modelo MOHID y caracterización del sistema

La base sobre la que se construye el modelo MOHID es la discretización espacial establecida por el usuario, quedando definida la potencia del medio poroso a través de los límites superior e inferior del sistema modelizado. Estos límites se establecen mediante el mapa digital del terreno (MDT) y el mapa digital de la base impermeable (MDB). Estos mapas, así como el resto de los mapas que son introducción al modelo, deben ser pre-procesados para que el tamaño de celda coincida en todos los casos. En el presente trabajo, precisamente, se ha empleado un MDT de 5 m del LIDAR 2008, del cual se ha obtenido un mapa cuyas celdas tienen una resolución de 0.002° .

Al igual que el modelo SWAT, MOHID también construye la red de drenaje sobre el MDT. En este caso lo que ocurre es que debido a la dependencia de la red de drenaje respecto a la resolución de la malla, suele ser necesario modificar levemente el MDT para que los cauces del modelo se aproximen a la localización de la red de drenaje real (Figura 2-34). Este proceso se llevó a cabo mediante la propia interfaz de MOHID Studio.

Toda la información que a continuación se detalla (ya sea mediante links a archivos ASCII, archivos de texto o mediante la definición de los parámetros o variables) se define mediante los archivos de texto mencionados en el apartado 2.3.1.2. *Modelo Hidrodinámico (MOHID)* e incluidos en el Anexo I.

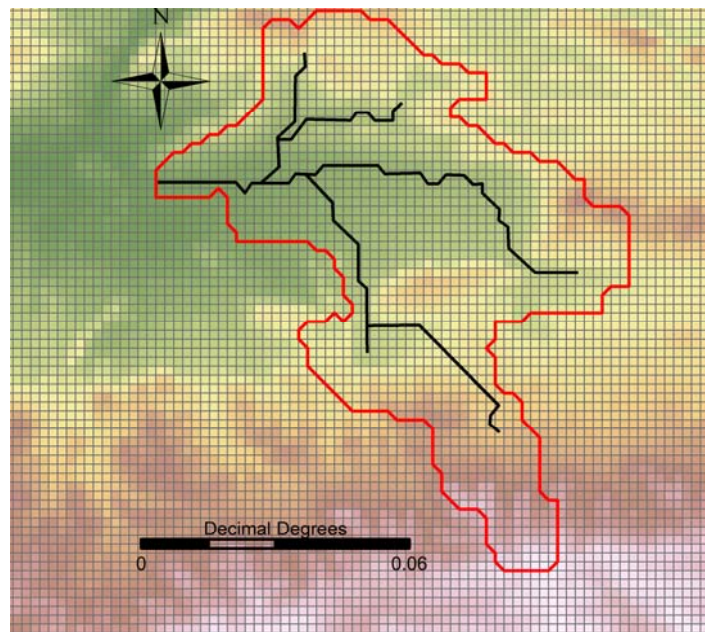


Figura 2-34. Delimitación de la zona de estudio y la red de drenaje sobre el modelo digital del terreno.

A continuación, se detalla la información empleada para la construcción del modelo no sujeta al proceso de calibración.

2.4.3.1. INFORMACIÓN METEOROLÓGICA

Para el modelo MOHID se necesitan datos meteorológicos de precipitación, radiación solar, temperatura, humedad relativa y velocidad del viento. Debido al corto paso temporal que emplea el modelo, los datos meteorológicos se han introducido con un paso diezminutal.

A pesar de que en un principio se creó un HDF para considerar la precipitación de las estaciones de Arkaute, Alegria y Kapildui, el hecho de que con el uso de este HDF aumentase el tiempo de cálculo y los índices estadísticos empeorasen en cierta medida, hizo que esta opción quedase descartada frente al uso de una serie temporal con los datos de precipitación de la estación de Alegria. Esta estación fue elegida por estar localizada en la parte central de la cuenca y registrar una precipitación entre la registrada en Arkaute y Kapildui.

2.4.3.2. CARACTERIZACIÓN DEL MEDIO POROSO

El medio poroso se representa por una serie de horizontes que son caracterizados por un número de capas de espesor determinado. En el presente trabajo, se han establecido dos horizontes principales. Uno, correspondiente a los materiales del acuífero y, el otro, correspondiente a los de los suelos. Al trabajar con modelos de este tipo es necesario intentar que los parámetros a calibrar sean los mínimos posibles para que el proceso de calibración no sea más complejo de lo que resulta habitualmente (Gallart et al., 2007), por lo que en este caso, los parámetros de los suelos quedaron fuera del proceso de calibración y fueron caracterizados en función de sus texturas (Figura 2-35) a través del software Rosetta (Schaap y Leij, 1998) (Tabla 2-18).

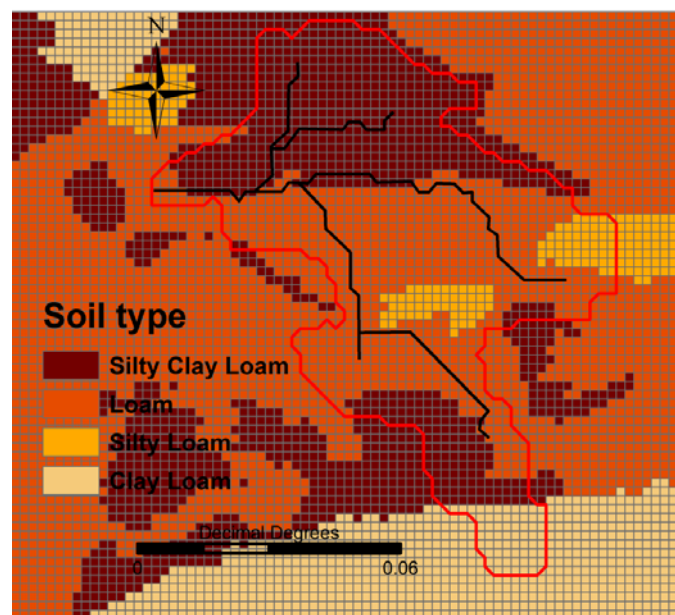


Figura 2-35. Mapa de texturas obtenido mediante la metodología definida en el apartado 2.4.1.2. Información edafológica.

No obstante, la caracterización del acuífero (concretamente, la conductividad hidráulica) se realizó mediante calibración, por lo que el proceso seguido se define en el apartado 2.4.4. *Calibración del modelo MOHID*. En cambio, la distribución vertical se definió

desde un principio considerando el aumento progresivo del espesor de las celdas a medida que aumenta la profundidad. Se establecieron un total de 12 capas verticales, cuyas dimensiones quedan reflejadas en la Tabla 2-19.

	Textura	Θ_s (cm ³ cm ⁻³)	Θ_r (cm ³ cm ⁻³)	n (-)	Ks (m d ⁻¹)	α (m ⁻¹)	ρ (kg m ⁻³)
(0-1.2 m)	Silty Clay Loam	0.4820	0.0901	1.5202	12	0.84	1270
	Loam	0.3991	0.0609	1.47	12	1.11	
	Silty Loam	0.4387	0.0645	1.66	0.18	0.51	
	Clay Loam	0.4418	0.0792	1.4145	0.08	1.58	
(>1.2 m)	Loam	0.35	0.0901	1.5202	Calibrado	0.84	1600

Tabla 2-18. Parámetros hidráulicos de las clases texturales (Θ_s : contenido hídrico en condiciones saturadas; Θ_r : contenido hídrico residual; n y α : parámetros de forma de van Genuchten; Ks: Conductividad hidráulica saturada; y ρ : densidad aparente).

Capa	Espesor (m)	Profundidad de la base (m)
K12 (sup.)	0.1	0.1
K11	0.2	0.3
K10	0.2	0.5
K9	0.2	0.7
K8	0.5	1.2
K7	1	2.2
K6	1	3.2
K5	1.25	4.45
K4	1.5	5.95
K3	1.75	7.7
K2	2.25	9.95
K1 (prof.)	4.9	14.85

Tabla 2-19. Características de las capas que definen la discretización vertical del modelo.

Por otro lado, deben ser definidos los mapas que representan el coeficiente de rugosidad de Manning para el cálculo de la escorrentía superficial (Figura 2-36; valores asignados durante la calibración) y el que define la impermeabilidad de la superficie (Figura 2-37; valores comúnmente empleados según comunicación personal).

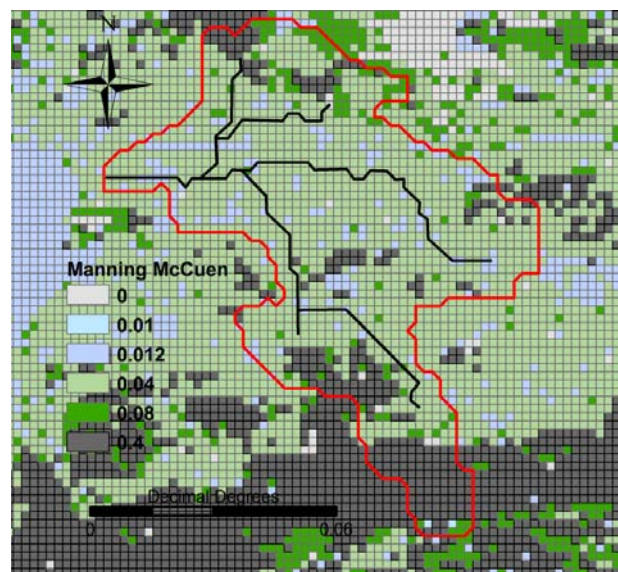


Figura 2-36. Mapa de valores del coeficiente de Manning.

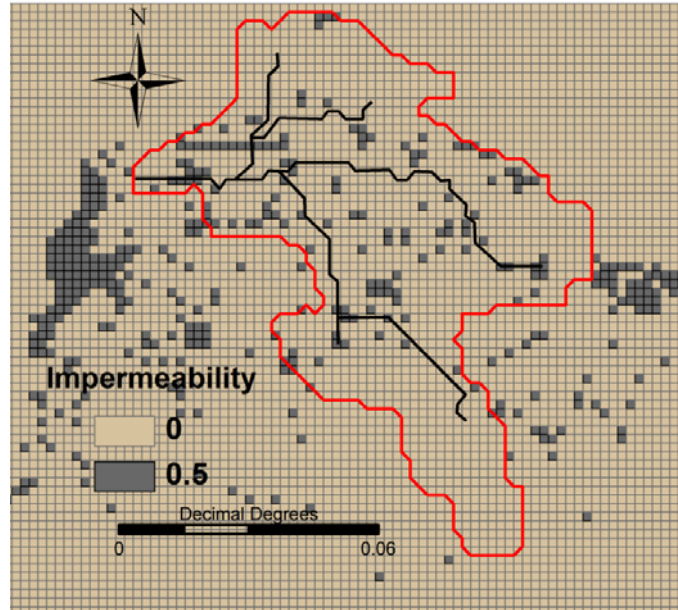


Figura 2-37. Mapa de impermeabilidad.

2.4.3.3. INFORMACIÓN AGRONÓMICA

Ciclos de los cultivos

Basándose en la información presentada en el apartado 2.1.4. *Actividad agrícola*, se establecieron los siguientes ciclos de cultivos a considerar en el modelo:

- Cebada: 4-Nov/25-Jul
- Trigo de invierno: 5-Nov/26-Jul
- Trigo de primavera: 4-Feb/30-Ago
- Avena: 11-Nov/28-Jul
- Patata: 21-Abr/26-Oct
- Remolacha: 15-Feb/25-Oct

Rotación de los cultivos

Las rotaciones de cultivos suponen un cambio tanto espacial como temporal. Por ello, es necesario crear un archivo HDF con el que introducir este tipo de datos en el modelo. En realidad, este archivo se construye mediante la distribución espacial de series temporales a celdas de la malla y puede crearse mediante herramientas de pre-procesado como *FillMatrix*. Para la construcción de este archivo, hicieron falta (i) series temporales que definiesen las rotaciones, y (ii) una malla a la que asignar dichas series, es decir, un mapa de prácticas agrícolas.

Es importante aclarar que los mapas que se muestran a continuación y por lo tanto, los empleados para definir las prácticas agrícolas de la zona, no corresponden a la delimitación final de la cuenca (53.6 km²), sino a una delimitación inicial más extensa (188.3 km²), y descartada posteriormente por motivos de altos requerimientos computacionales. En cualquier caso, se asume que la proporción de la ocupación era bastante similar en ambas delimitaciones.

Así, se definieron todas las rotaciones que se querían considerar (Tabla 2-20) y se estudió el mapa de vegetación, creado a partir del mapa de usos del suelo del año 2008 facilitado por Neiker-Tecnalia. Como se ha mencionado anteriormente, este mapa ha de ser procesado para que la resolución de los datos coincida con la malla definida para el modelo (Figura 2-38).

Rotación - Uso	Código
Cebada/Remolacha/Trigo	1
Remolacha/Trigo/ Cebada	2
Trigo/ Cebada/ Remolacha	3
Avena/Remolacha/Trigo	4
Remolacha/Trigo/ Avena	5
Trigo/ Avena / Remolacha	6
Cebada/Patata/Trigo	7
Patata/Trigo/ Cebada	8
Trigo/ Cebada/ Patata	9
Avena /Patata/Trigo	10
Patata/Trigo/ Avena	11
Trigo/ Avena / Patata	12
Trigo/Cebada	13
Cebada/Trigo	14
Trigo/Barbecho	15
Agrícola	16
Sin vegetación	17
Bosque	18
Pasto	19
Agua	20

Tabla 2-20. Desglose de las alternativas consideradas durante la definición de las rotaciones.

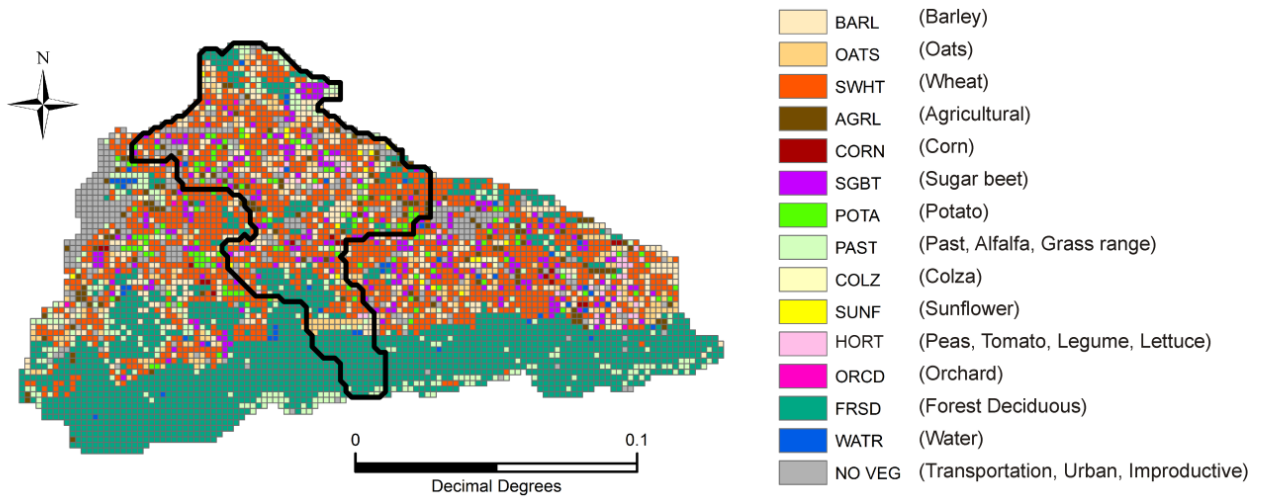


Figura 2-38. Mapa de base empleado en el modelo MOHID (vegetation map).

El estudio de este mapa permitió clasificar las celdas en cuanto a su uso y así, se pudieron cuantificar las mismas para su posterior tratamiento (Figura 2-39). A continuación, se creó el mapa de prácticas agrícolas (Figura 2-40), el cual representaba la distribución espacial de los códigos asignados en la Tabla 2-20. Este proceso, es un proceso laborioso el cual es imprescindible verificar para asegurarse de que mediante el HDF creado la extensión de los cultivos se mantiene estable a lo largo de los años (Tabla 2-21).

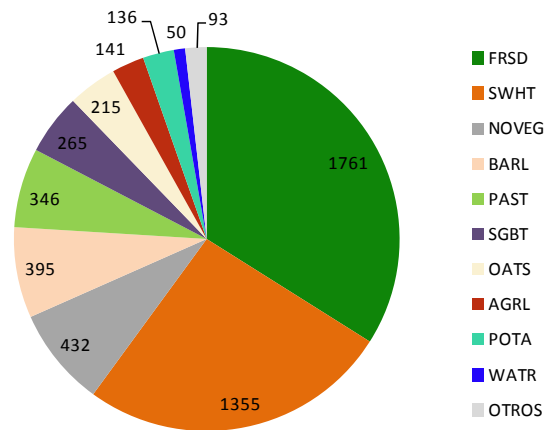


Figura 2-39. Cuantificación del número de celdas atribuidas a cada tipo de vegetación.

Uso	Año 1		Año 2		Año 3		
	Celdas	Km ²	Celdas	Km ²	Celdas	Km ²	
Parcelas agrícolas	Trigo	1400	50.8	1410	51.1	1444	52.4
	Cebada	437	15.8	498	18	471	17.1
	Remolacha	265	9.6	271	9.7	279	10.1
	Avena	269	9.7	164	6	201	7.2
	Patata	136	4.9	164	6	112	4
	Cultivo	93	3.4	93	3.4	93	3.4
Otros	Bosque	1761	64	1761	64	1761	64
	Sin vegetación	432	15.7	432	15.7	432	15.7
	Pasto	346	12.6	346	12.6	346	12.6
	Agua	50	1.8	50	1.8	50	1.8
Ext. total	5189	188.3	5189	188.3	5189	188.3	

Tabla 2-21. Extensión anual ocupada por cada cultivo según la rotación establecida.

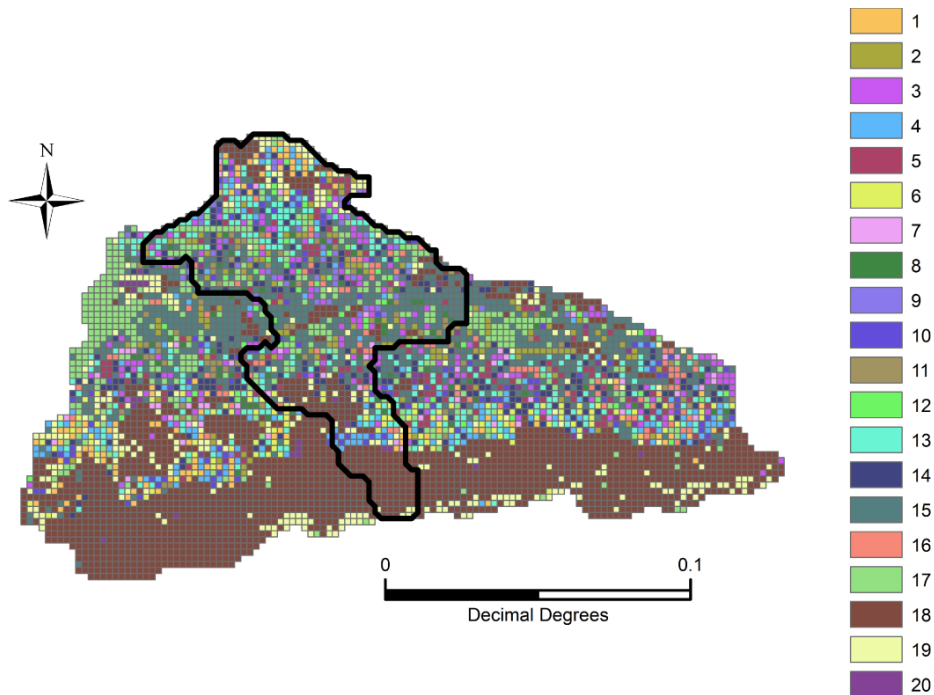


Figura 2-40. Mapa de IDs empleado en el modelo MOHID (ID map).

Realmente, el archivo HDF creado almacena información de la evolución temporal de un identificativo de la gestión agrícola de cada celda, identificativo que es vinculado a cuatro archivos diferentes:

- PARAMETERS_FILE: relaciona cada ID de gestión (valor asignado por el usuario) agrícola con un determinado tipo de vegetación, así como la duración de su ciclo (día de siembra y cosecha) y la aplicación de fertilizantes (tipo y fecha de aplicación).
- FEDDES_DATABASE: define los parámetros de Feddes para cada tipo de vegetación (Tabla 2-22).
- GROWTH_DATABASE: almacena una base de datos con todos los parámetros empleados para la simulación del crecimiento vegetal.
- FERTILIZER_DATABASE: almacena la información relacionada con el tipo de fertilizantes, así como las fracciones orgánicas y minerales de N y P, y la profundidad a la que se aplica el fertilizante.

Cultivo	h1 (m)	h2 (m)	h3 (m)	h4 (m)
Patatas y Remolacha azucarera	-0.1	-0.25	-4.5	-160
Cereal	0	-0.01	-7	-160
Pasto	-0.1	-0.25	-5	-80

Tabla 2-22. Valores de succión de Feddes (Feddes y Raats, 2004).

Fertilización

Al igual que para el modelo SWAT, en MOHID se han establecido las siguientes cantidades de fertilizante (aplicadas en dos dosis): 160, 160, 200, 230 y 155 Kg N ha⁻¹ para la cebada, avena, trigo, patata y remolacha, respectivamente.

Riego

Por el momento, sólo se puede introducir el riego en el modelo MOHID en forma de serie temporal, lo que significa que serviría si en toda la cuenca se aplicase esta práctica simultáneamente. Como no es el caso, no ha quedado otra opción que no considerar esta práctica; aún así, se piensa que el efecto no tiene por qué tener gran repercusión, ya que los cultivos de regadío ocupan únicamente un 12% de la extensión agrícola.

2.4.3.4. CONDICIONES INICIALES

Tanto las condiciones hídricas iniciales como las referentes a los nutrientes deben ser establecidas en el modelo. Los valores empleados se muestran en el Anexo I.

Así, el **volumen de agua inicial** debe establecerse mediante la definición de la superficie freática y el contenido hídrico de la zona no saturada. La posición freática se estableció mediante un archivo ASCII (al fin y al cabo, un mapa), creado de la interpolación de los niveles observados en los distintos pozos de la cuenca. Debido a que estas medidas de campo se tomaban durante los últimos días de cada mes, con el objetivo de que las condiciones iniciales del modelo estuviesen lo más próximas posibles a las condiciones reales, el mapa creado se basó en medidas tomadas el 28 de enero del año 2008 y la simulación se inicializó ese mismo día. Por otro lado, las condiciones hídricas de la zona no saturada, se establecieron tal

que el contenido de cada celda situada por encima de la superficie freática estuviese en la condición de capacidad de campo. Esta opción se establece mediante el parámetro **START_THETA_FIELD**.

Si bien es cierto que al emplear el módulo Sediment Quality es necesario que numerosos parámetros sean definidos, al emplear la simplificación descrita en el apartado 2.3.1.2. *Modelo Hidrodinámico (MOHID)* la caracterización inicial de los **nutrientes** se hace en base a únicamente tres aspectos. Estos son el contenido inicial de carbono disuelto (DOC; mg N l⁻¹) y particulado (POC; g N kg⁻¹), y la concentración de nitratos en el agua del medio poroso (mg N l⁻¹). Los valores asignados a cada uno de estos parámetros se muestran en la Tabla 2-23.

Parámetro	Descripción	Unidad	Valor inicial	Valor calibrado
POC'	Valor inicial de la concentración de POC	g kg ⁻¹	19 (0-30 cm), 14.8 (30-60 cm) y 8.8 (60-90)	9.5 (0-30 cm), 7.4 (30-60 cm) y 4.4 (60-90)
DOC'	Valor inicial de la concentración de DOC	mg N l ⁻¹	4.5	-
NO3'	Valor inicial de la concentración de NO3	mg N l ⁻¹	12	-

Tabla 2-23. Valores iniciales establecidos en el modelo MOHID.

2.4.4. Calibración del modelo MOHID

La calibración de este modelo difiere significativamente con respecto a la calibración del modelo SWAT, especialmente en lo que a los parámetros hidráulicos se refiere. El hecho de que MOHID sea un modelo físico hace que éste trabaje con parámetros físicos que, en principio, no requieren calibración alguna (Refsgaard, 1997). No obstante, la distribución puntual de los datos de campo o la heterogeneidad de éste, hace que en muchas ocasiones la calibración sea necesaria. Precisamente, la calibración de este modelo durante el presente trabajo se ha basado en el incremento de la complejidad del modelo, lo que significa que, más que una calibración de los parámetros, se ha estudiado qué nivel de complejidad es el que de mejores resultados.

El proceso de calibración ha sido uno de los aspectos más complicados y laboriosos de esta Tesis Doctoral. El hecho de que prácticamente no exista bibliografía relacionada con la simulación de flujo en medios porosos mediante este modelo, así como la imposibilidad de obtener balances de masa (tanto de agua como de nutrientes), hizo que el proceso de calibración fuese realmente costoso durante la primera etapa de trabajo. Posteriormente, e influido por las necesidades surgidas durante este trabajo, el grupo Maretec del Instituto Técnico de Lisboa ha ido desarrollando el código MOHID incorporando en el mismo nuevas opciones que permiten obtener valores más globales (balance de agua, valores integrados de caudal...), que son completamente necesarios para trabajar a escala de cuenca.

Así, durante la primera etapa de trabajo, el esfuerzo se centró en realizar simulaciones cortas en las que se estudió la sensibilidad no sólo de los parámetros citados en el apartado 2.4.4. *Calibración del modelo MOHID* sino que también de las opciones de simulación que tiene el código (Anexo I). No obstante, tras la experiencia adquirida se estima necesario realizar simulaciones cuya duración sea suficientemente larga para poder observar las tendencias generales y analizar en todo caso el balance hídrico simulado.

Debido a la larga duración de las simulaciones, se tuvieron que modificar los siguientes aspectos del modelo durante la primera etapa de trabajo:

- Delineación del modelo (disminuyendo la extensión del modelo en un 70%)
- Tamaño de las celdas (doblando su dimensión inicial; de 0.001 a 0.002^o)

Con esta última definición de los límites el modelo queda discretizado en un total de 1438 celdas en la dirección horizontal y, según la geometría, en un máximo de 12 capas verticales. Es importante tener en cuenta, que los ordenadores empleados requieren en torno a 20 horas para llevar a cabo simulaciones de un año de duración con todos los procesos considerados por el modelo.

A continuación se describen los principales cambios realizados con respecto al modelo inicial durante el proceso de calibración.

2.4.4.1. CALIBRACIÓN DE LOS PARAMETROS RELACIONADOS CON LOS PROCESOS HIDROLÓGICOS

La calibración de los parámetros que controlan los procesos hidrológicos del modelo se realizó a nivel diario para el periodo 21-Oct-2009/31-Dic-2010. Tras establecer el modelo inicial y llevar a cabo numerosas simulaciones, se comprobó que los parámetros más sensibles en cuanto a la piezometría y caudal simulado son la conductividad hidráulica saturada del medio, la transpiración, la morfología de los canales y el espesor del medio poroso. En efecto, estos son los parámetros que condicionan el balance hídrico, movimiento de agua y posición del nivel freático, es decir, el gradiente que condiciona el flujo entre celdas o entre el medio poroso y los canales. Los aspectos que en mayor detalle han sido estudiados son los siguientes:

Espesor del medio poroso

Al tratarse de un modelo físico, el espesor del medio poroso toma un papel importante en lo que al flujo y a la posición del nivel freático se refiere. Para definir el modelo inicial, se empleó la herramienta *Porous Media* de la interfaz de MOHID, la cual construye el espesor del medio poroso en base a la pendiente y un valor de espesor mínimo y máximo definidos por el usuario. Este espesor puede ser empleado como simplificación de un medio, no obstante, el hecho de disponer de información que sugiere la presencia de surcos en el sustrato margoso que favorece un mayor espesor de los depósitos cuaternarios, hizo que se considerara un espesor más representativo de la zona de estudio.

Mediante la información obtenida por Arrate (1997) se crearon tres mapas de espesores, basados en los valores mínimos, máximos y medios, respectivamente, de los rangos definidos por este autor, aunque finalmente se optó por el mapa de espesores medios, pues se pensó que era más adecuado que emplear valores límite. En la Figura 2-41 se muestra el mapa de espesores considerado por el modelo, una vez reorganizado el nivel de la base del medio poroso (apartado 2.3.1.2. *Modelo Hidrodinámico (MOHID)*).

Una vez definido el espesor total, se procedió a identificar el número de horizontes a considerar y la potencia de los mismos. Como simplificación, se optó por la distinción de dos

horizontes, uno que representase el conjunto de los materiales cuaternarios, generalmente más permeables, y otro, los materiales más limo-arcillosos de los suelos que los cubren.

El siguiente paso consistió en establecer el espesor de cada horizonte, asignando a cada uno un número de capas determinado. Debido a las diferencias hidrológicas de cada horizonte, el espesor asignado tiene repercusión sobre los flujos de agua del modelo y, por ello, el espesor de los suelos tiene que ser detalladamente estudiado. No obstante, es un factor que conlleva una gran incertidumbre, ya que a escala de cuenca las medidas de campo son puntuales y no queda otra opción que simplificar el modelo basándose en las medidas de campo disponibles.

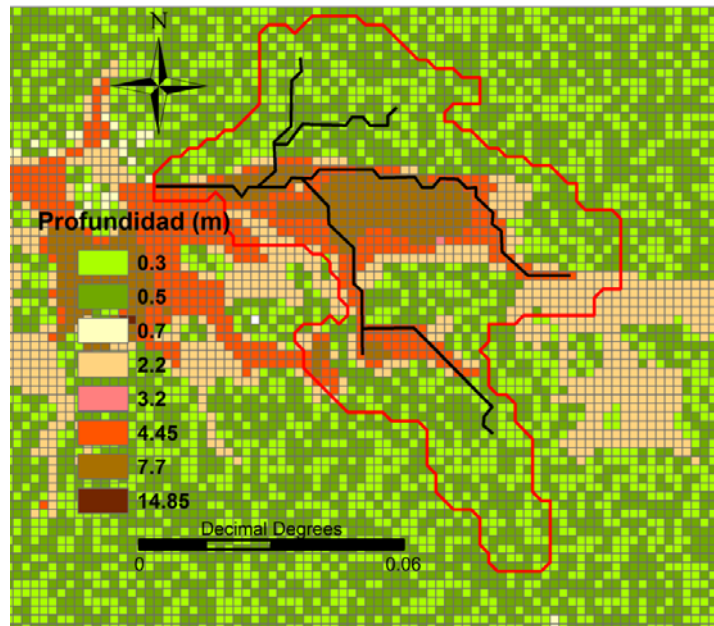


Figura 2-41. Espesor del medio poroso tras ser reorganizado en base a la discretización vertical.

Así, con el objetivo de representar los suelos más desarrollados en la parte central de la cuenca (Martínez, 2008), se estableció un horizonte superficial de 1.2 m (Arrate, 1997; Martínez, 2008; Muñoz, 2012) y se limitó el espesor del medio poroso en la parte externa de la delimitación de los materiales cuaternarios a 0.5 m, forzando al modelo a que en esta zona los suelos tomaran ese menor espesor. El horizonte profundo se vinculó a los materiales cuaternarios (Figura 2-42).

Tal y como se ha mencionado, el espesor del medio inevitablemente influye sobre el nivel piezométrico simulado, pues el espesor establece la cota de la base del medio poroso en función a la cota del MDT. Por esta razón, la propia resolución del MDT puede afectar el nivel piezométrico simulado. Tras estudiar la tendencia y la amplitud de niveles simulados y observados se identificaron los posibles factores que podían estar repercutiendo sobre las diferencias en los mismos. A pesar de que la porosidad o conductividad hidráulica podían explicar en parte estas diferencias, se atribuyó en gran medida a la diferencia de cota entre la base real del acuífero y la simulada. En un principio, se trató de ajustar la cota del MDB del modelo, pero debido a la reorganización que MOHID realiza en función de la discretización vertical, resulta realmente complicado considerar los cambios de espesor que se desea, pues

sería necesaria una discretización mucho más fina en las capas más profundas, lo que aumentaría considerablemente el tiempo de cálculo del modelo. Para evitar esto, se optó por estudiar las tendencias de los niveles piezométricos en las celdas adyacentes a aquellas en las que se sitúa el punto de observación y, en cualquier caso, quedarse con la tendencia mejor simulada para la calibración del modelo.

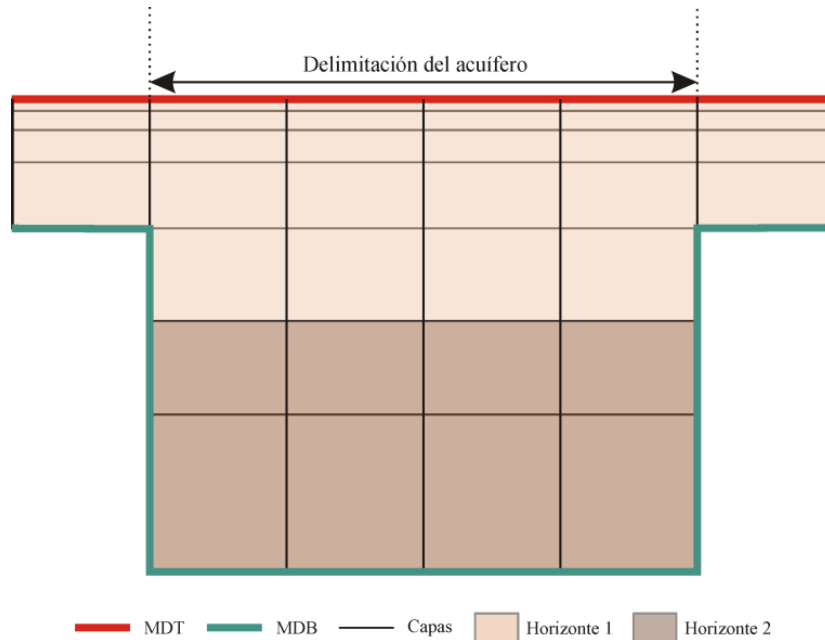


Figura 2-42. Representación de la discretización espacial del modelo.

Morfología de los canales

La propia morfología de los canales, definida en función de los órdenes de Strahler (Trancoso et al., 2009), también condiciona el flujo entre el medio poroso y los ríos, pues influye en la altura de la lámina de agua y, por lo tanto, en el gradiente hidráulico creado entre estos dos medios. Si bien es cierto que se realizaron numerosas pruebas para estudiar el impacto de la morfología sobre el caudal simulado, las medidas definidas estuvieron basadas en la información detallada en Cerro (2013).

Mediante cambios en la morfología de los canales, se intentó aumentar el gradiente, pues la descarga del acuífero a los ríos se intuía baja por el bajo caudal de los ríos especialmente durante los meses de estiaje. El aumento de la altura de los canales, sin embargo, trajo que en ocasiones la cota de su base estuviese por debajo de la cota del MDB, impidiendo flujo alguno entre los dos medios. Para solucionar este problema se intentó aumentar el espesor del medio poroso en aquellas zonas en las que se daban estas condiciones pero los caudales simulados no variaban tanto como había sido esperado.

Por ello, a pesar de que se aconseja estudiar la morfología de los canales con respecto al espesor del medio en modelos de este tipo, se estimó oportuno dejar la morfología simplificada (Tabla 2-24) y calibrar otros parámetros con mayor influencia sobre la descarga del acuífero al río, como es, por ejemplo, la conductividad hidráulica del medio poroso.

	Longitud superficial (m)	Longitud de la base (m)	Altura (m)
Strahler 1°	2	1.5	4.4
Strahler 2°	5	4	4.4
Strahler 3°	10	8	4.4

Tabla 2-24. Características morfológicas de la red de drenaje del modelo.

Conductividad Hidráulica Saturada (Ks)

La conductividad hidráulica del medio es al fin y al cabo el factor que gobierna el flujo en el medio poroso y la velocidad de intercambio entre río y acuífero. Su valor no ha sido sujeto a calibración en el caso de los suelos, y en el caso del acuífero su valor ha sido estimado a partir de datos recopilados en Arrate (1997) con excepción de unas determinadas zonas en las que la calibración fue la única opción para obtener buenas simulaciones de niveles piezométricos. Tal y como se ha mencionado, en la Tabla 2-25 se muestran los datos de transmisividad, T, y espesor saturado, b, definidos por el mismo autor y los rangos de conductividad hidráulica, K, y el valor medio de K empleados en este estudio. En la Figura 2-43 se muestra el mapa final empleado para definir la conductividad hidráulica del acuífero cuaternario.

Zona	T (m ² d ⁻¹)	b (m)	Rango K (m d ⁻¹)	K media (m d ⁻¹)
1	28	1-1.5	28-19	24
2	130	4-9	33-14	24
3	79	2-8	40-10	25
4	20	2-6	10-3	7
5	26	2-4	13-7	10
6	49	1.5-4	33-12	23
7	220	4-6	55-37	46
8	25	1-1.5	25-17	21
9	27	2-4	14-7	11
10	5	1.5-4	3-1	2
11	5	1-1.5	5-3	4

Tabla 2-25. Valores de transmisividad (T) y espesores (b) obtenidos para las zonas propuestas por Arrate (1997) y el rango de conductividad hidráulica (K) y el valor medio empleado.

Además del propio valor de la conductividad hidráulica saturada de los suelos, es necesario establecer la forma en la que se quiere considerar el valor de la conductividad hidráulica al simular el flujo entre dos celdas adyacentes. Existen cuatro métodos diferentes (valor máximo, mínimo, medio y ponderado al espesor), de los cuales se ha escogido el valor mínimo por motivos de rapidez de simulación, pues la conductividad hidráulica es un parámetro que tiene gran impacto sobre los requerimientos computacionales. No obstante, en el presente estudio, tras comprobar que la descarga estaba siendo correctamente simulada, no se profundizó en las diferencias simuladas mediante cada método.

Durante el proceso de la calibración de la conductividad hidráulica saturada (Ks), también se estudió cual de los dos horizontes que componen el medio poroso (suelo o acuífero) tenía mayor impacto sobre el hidrograma simulado (Figura 2-44).

Tal y como se muestra en esta figura, el aumento de un 20% de la conductividad hidráulica saturada del acuífero con respecto a un modelo base (4.3.3. *Análisis de sensibilidad*) provoca un ascenso mucho más notable que el aumento de este valor de los materiales que

componen el suelo. Precisamente, esta observación fue la empleada para decidir que los suelos serían definidos de acuerdo con las funciones de pedotransferencia, sin ser sujetos a calibración alguna. Por el contrario, la sensibilidad del hidrograma simulado frente a los valores de K_s del acuífero fue decisiva para establecer valores espacialmente variables (Figura 2-25) frente a un único valor empleado en un modelo inicial, con lo que se consiguió una mejora considerable. Posteriormente, se modificó la K_s de zonas muy concretas (valor 0.1 m d^{-1}) con el objetivo de ajustar los niveles piezométricos de esas zonas.

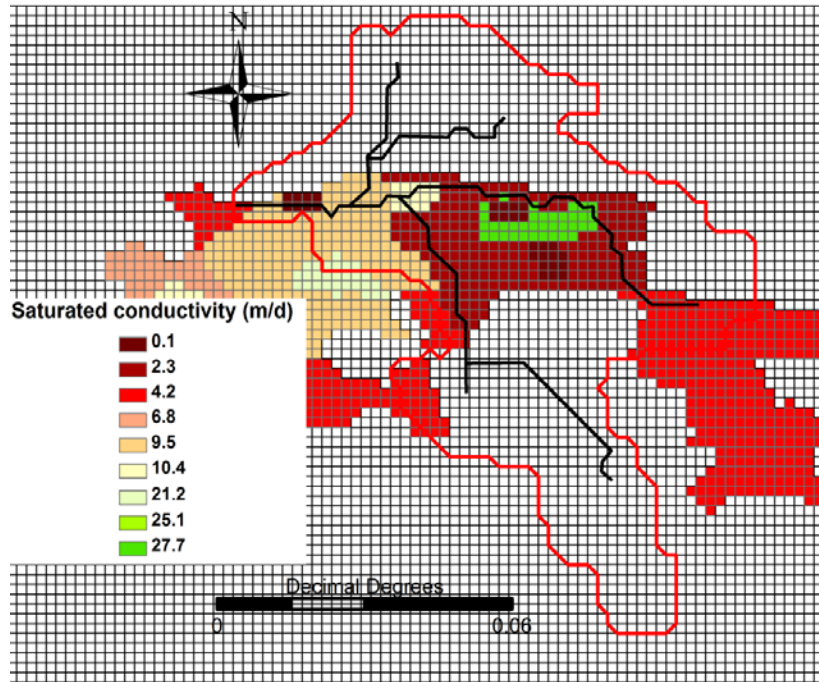


Figura 2-43. Mapa de zonas de conductividad hidráulica saturada del Horizonte 2 (material acuífero).

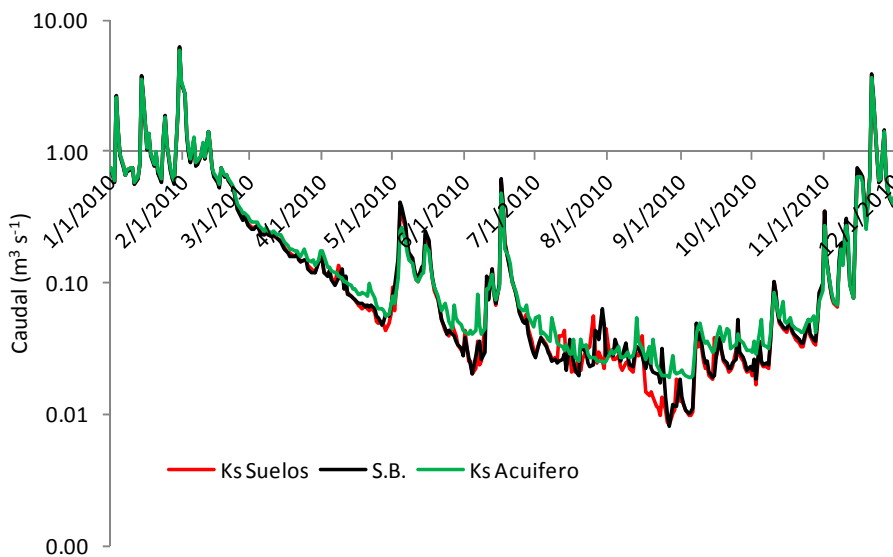


Figura 2-44. Caudal simulado por tres modelos que difieren en cuanto a la conductividad hidráulica. El modelo Ks Suelos, en rojo, representa un aumento del 20% del valor K_s de los suelos y el modelo Ks Acuífero, en verde, representa un aumento del 20% del valor K_s del acuífero.

Hay que destacar, que tanto la Figura 2-44 como la Figura 2-45 han sido tomadas del análisis de sensibilidad llevado a cabo con posterioridad al propio proceso de calibración (4.3.3. *Análisis de sensibilidad*), no obstante, durante la calibración las tendencias observadas fueron muy similares.

Factor de Conductividad Hidráulica Horizontal (Kh)

El ratio Kh:Kv (conductividad hidráulica horizontal: conductividad hidráulica vertical) de anisotropía de la conductividad hidráulica es el parámetro más sensible en cuanto al caudal se refiere, además de la conductividad hidráulica saturada del acuífero. Éste varía en función del material y de la escala, y mientras que en testigos este ratio suele presentar valores del orden de 2-10:1, a escala de campo puede llegar a ser del orden de 100:1 (Freeze y Cherry, 1979). Precisamente, Cartwright y Hensel (1995) reportaron valores del ratio Kh:Kv de entre 2 y 100 para limos y arcillas estratificadas.

En el presente trabajo, se observó que este parámetro tiene un gran impacto sobre el hidrograma simulado, aumentando el caudal durante los periodos de estiaje especialmente al incrementar su valor. Cabe destacar, que el aumento de este parámetro tiene un efecto similar al aumento de la conductividad del acuífero. No obstante, es importante considerar que mientras que la conductividad hidráulica puede establecerse mediante un mapa el cual distribuye espacialmente los valores de Ks, el factor Kh debe establecerse para todo el conjunto del medio poroso.

Con el objetivo de obtener un mayor caudal de base, una vez los mapas de conductividad hidráulica habían sido establecidos, este parámetro se obtuvo mediante calibración o modelización inversa. Se hicieron diferentes simulaciones aumentando su valor desde un valor inicial igual a 1 y se observó que el caudal de base simulado se ajustaba al caudal observado con valores en torno a 25. En la Figura 2-45 puede observarse la diferencia entre un aumento y un descenso de un 20% respecto al valor base de 25.

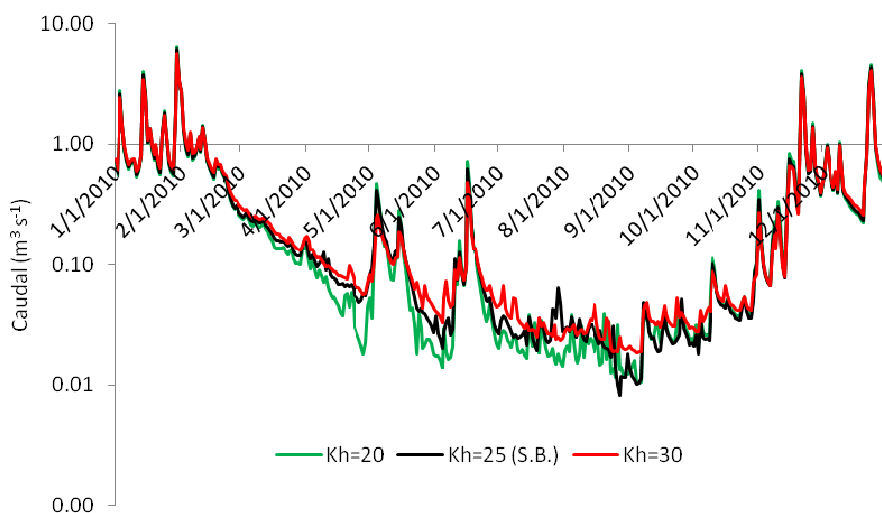


Figura 2-45. Caudal simulado por tres modelos que difieren en cuanto al factor de la conductividad hidráulica horizontal. La línea verde representa un descenso del valor de Kh (20) y la roja, un aumento (30) respecto a la simulación de base (25).

Contenido hídrico saturado (Θ_s)

A los materiales cuaternarios se les asignó un único valor de Θ_s , el cual fue obtenido mediante calibración. Si bien es cierto que en un principio se pensaba que este parámetro tendría un gran impacto sobre la simulación del nivel freático y el caudal, posteriormente pudo comprobarse que esto no era así debido a la consideración de los parámetros hidráulicos de las capas en las que se sitúa el nivel freático, el cual es empleado para calcular los flujos entre río y acuífero.

En lo que a la simulación del nivel freático se refiere, hay que destacar que este parámetro impacta ligeramente sobre la simulación, por lo que, tras observar que con su modificación prácticamente se mantenía similar el nivel freático simulado, se procedió a dejar un único valor para toda la zona considerada.

Coefficiente de Cultivo (K_c)

La simulación de la evapotranspiración también tiene gran impacto sobre la piezometría y el caudal simulado ya que afecta directamente al balance hídrico del sistema. MOHID permite escoger entre varias opciones de simulación; los valores establecidos para cada parámetro relacionado con la evapotranspiración se muestran en el ANEXO I.

El código emplea valores de coeficiente de cultivo, K_c , para limitar la evapotranspiración de referencia, los cuales puede encontrarse en Allen et al., (1998). Estos valores están por lo general agrupados para el estadio inicial, el medio y el final de crecimiento de cada cultivo, asumiendo así que el valor de K_c durante un estadio se mantiene constante a lo largo de la duración del mismo.

En el modelo, el K_c tiene un valor igual a 1 por defecto, lo que significa que la evapotranspiración de referencia, ET_0 , es igual a la evapotranspiración de cultivo, ET_c , sobreestimando ésta durante algunos periodos y subestimándola durante otros.

Con el fin de ajustar el parámetro K_c para que la evapotranspiración se adecúe en mayor grado a la vegetación y prácticas agrícolas de la cuenca a estudio, se fueron realizando diferentes simulaciones en las cuales se iban considerando escenarios cada vez más complejos en relación al K_c . No obstante, no fue necesario llevar a cabo una modelización inversa de este parámetro, tal y como se está llevando a cabo en recientes estudios (Zhang et al., 2011), puesto que a nivel de cuenca, con las simulaciones más complejas detalladas a continuación, se obtuvieron resultados satisfactorios.

Los resultados se evaluaban en términos de ET anual y ET mensual simulada, la cual se comparaba con los resultados del modelo SWAT. A continuación se hace una breve descripción de los escenarios simulados:

Los primeros escenarios empleaban **valores constantes** de K_c ($K_c=1$, $K_c=0.8...$). Por lo general, estos escenarios simulaban una evapotranspiración anual demasiado alta, por lo que se estimó necesario simular el valor de K_c de acuerdo con los cultivos de la cuenca. Para ello, se pensó en crear una **serie temporal** que considerase los valores de K_c de cada cultivo ponderados a la extensión ocupada, tal y como hicieron Orang et al., (2013) en otro estudio.

Para crear esta serie temporal, fue necesario, por un lado, estimar valores de Kc mensuales basados en Allen et al., (1998) y, por otro, calcular el Kc de los suelos desnudos. Considerando que Allen et al., (1998) tiene tabulados únicamente tres valores, los correspondientes a los estadios mostrados en la Figura 2-25, y que este parámetro cambia gradualmente a medida que avanza el ciclo de crecimiento, fue necesario interpolar los valores de cada estadio de tal forma que se consiguiesen valores mensuales continuos (Tabla 2-26, Figura 2-46).

	Cereal invierno	Cereal Primavera	Patata	Remolacha
Enero	0.9	-	-	-
Febrero	1.0	0.7	-	-
Marzo	1.1	0.63	-	0.35
Abril	1.15	0.91	-	0.63
Mayo	0.87	1.15	0.5	0.91
Junio	0.6	1.15	0.8	1.2
Julio	0.3	0.78	1.15	1.2
Agosto	-	0.4	1.15	1.2
Septiembre	-	-	0.95	0.95
Octubre	-	-	0.75	0.7
Noviembre	0.7	-	-	-
Diciembre	0.8	-	-	-

Tabla 2-26. Valores mensuales del Kc empleados en el modelo.

En cuanto al valor de Kc de los suelos desnudos se refiere, en la literatura existen diferentes métodos para la estimación de su valor. Entre ellos está el método aconsejado por Allen et al., (1998), el cual fue definido por Stroonsnijder (1987) y modificado posteriormente por Snyder et al., (2000). Este método asume que la evaporación de la parte expuesta del suelo ocurre en dos etapas diferenciadas: la primera, limitada por la cantidad de energía disponible, y la segunda, limitada por las propiedades hidráulicas de los suelos. No obstante, existe otro método simplificado propuesto por Ventura et al., (2006) y empleado en la actualidad (Orang et al., 2013). Este método estima el valor de Kc del suelo desnudo a través de una función que relaciona la raíz cuadrada de la ET₀ acumulada con la raíz cuadrada de la potencia de la ET₀ y el número de días entre episodios lluviosos mediante las Ecuaciones 2-74 y 2-75.

$$(CET_0)^{0.5} = \sqrt{DBR * ET_0} \quad (2-74)$$

$$Kc = \frac{2.54}{\sqrt{CET_0}} \quad (2-75)$$

Donde:

CET₀ es la evapotranspiración de referencia acumulada (mm),

DBR es el número de días entre los episodios de lluvia (-),

ET₀ es el promedio diario de evapotranspiración de referencia durante los días sin lluvia (mm),

Kc es el valor del coeficiente de cultivo para suelo desnudo para el periodo calculado (-).

En el presente estudio, el valor de Kc para los suelos desnudos se ha estimado en base a la información meteorológica de los años 2009-2010. Tras calcular el promedio diario de la ET₀ de cada mes, se procedió a contar el número de días entre los episodios lluviosos (DBR) y, aplicando la ecuaciones citadas, se obtuvieron los valores de Kc mostrados en la Tabla 2-27.

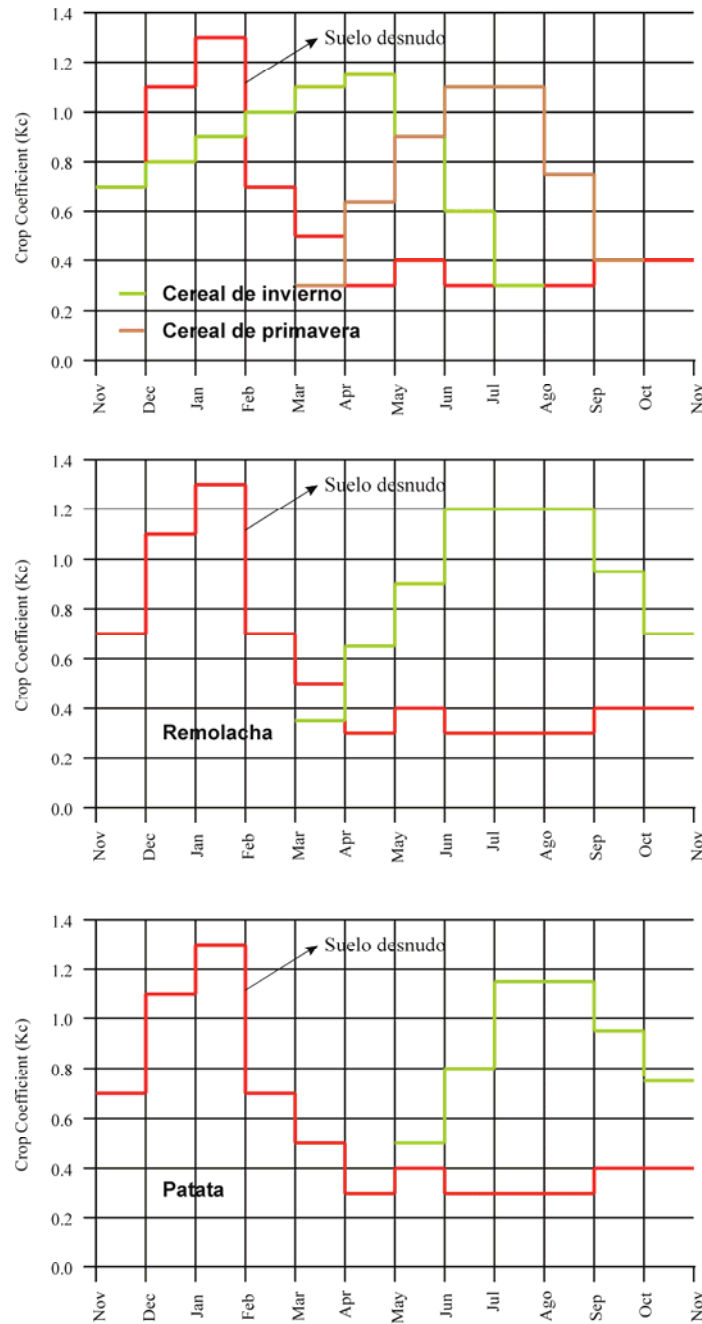


Figura 2-46. Valores del coeficiente de cultivo empleados en el modelo.

Los valores obtenidos indican que, tal y como afirman Allen et al., (1998), en condiciones en las que el suelo se encuentra humedecido la mayoría del tiempo debido a la lluvia o riego, su valor sobrepasa la unidad y, por el contrario, cuando la superficie del suelo está seca, su valor puede estar próximo a 0.1.

Hay que considerar que durante los periodos no cultivados el valor de Kc es aquel calculado para suelos desnudos pero durante periodos cultivados, el valor de Kc empleado es el mayor entre el Kc para suelos desnudos y el Kc del cultivo (Orang et al., 2013).

Así, tras introducir la serie temporal con los valores de Kc en el modelo y observar la baja correlación con respecto a la evapotranspiración mensual simulada por el modelo SWAT, se pensó en la necesidad de introducir los valores de Kc mediante un archivo **HDF**, el cual

reflejase los cambios de K_c en base a los cultivos simulados de una forma distribuida espacialmente.

	ET_0 (mm d ⁻¹)	DBR	K_c
Enero	0.3	15	1.3
Febrero	0.9	14	0.7
Marzo	1.4	21	0.5
Abril	2.6	24	0.3
Mayo	2.5	19	0.4
Junio	2.8	19	0.3
Julio	3.3	29	0.3
Agosto	3.3	25	0.3
Septiembre	2.2	23	0.4
Octubre	1.5	24	0.4
Noviembre	0.8	16	0.7
Diciembre	0.3	16	1.1

Tabla 2-27. Valores mensuales de la evapotranspiración de referencia (ET_0), los días entre episodios lluviosos (DBR) y el valor calculado del coeficiente de cultivo (K_c).

Por último, y tratando de conseguir una evapotranspiración más alta durante los meses de verano, se introdujo al modelo un cultivo que anteriormente no había sido considerado, un cereal de primavera. Este cultivo trajo un aumento en la evapotranspiración de verano, el cual podía estar representando unas prácticas más realistas o compensando la evapotranspiración de cultivos que no han sido cosechados para los meses de verano. En cualquier caso, la consideración de esta nueva práctica, la cual es totalmente posible/realista en la zona de estudio, hacía que el valor de ET se acercase más a aquel simulado por el modelo SWAT, considerando, ante todo, que en el modelo SWAT se estaba simulando el riego a una pequeña parte de la cuenca, lo que hacía que para este modelo fuese esperada una ET mayor.

Mediante la consideración del mapa HDF (Figura 2-47) fue posible simular una evapotranspiración similar por ambos modelos ($R^2=0.90$), la cual puede ser cuantificada en 396 y 390 mm/año para SWAT y MOHID respectivamente, considerando el periodo 2009-2011.

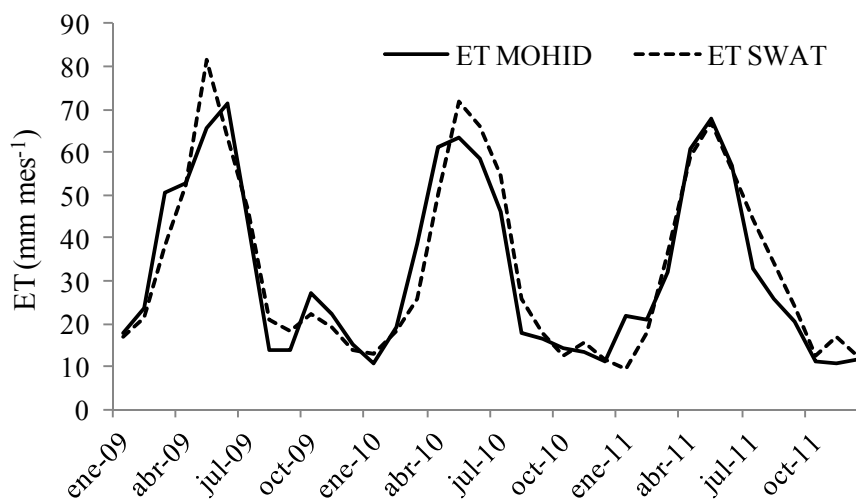


Figura 2-47. Evapotranspiración mensual simulada por los modelos SWAT y MOHID.

Coeficiente “n” de Manning

El coeficiente de rugosidad de Manning es uno de los índices más comunes para expresar la rugosidad de las superficies y es el factor que provoca cierto grado de retardo en el flujo en canales y superficie. Se comprobó que la modificación de este valor, tanto en el caso de los canales como en el de la superficie, tiene un efecto similar, siendo el hidrograma más sensible a los cambios realizados en el Manning de los canales. Generalmente, con el descenso de su valor se obtienen mayores caudales.

En cuanto al coeficiente de **Manning de los canales** se refiere, se obtuvo un valor mediante modelización inversa, tomando para ello dos valores límite (0.03 y 0.09) establecidos por Chow (1959). Tras realizar varias simulaciones y estudiar visualmente el cambio producido en el hidrograma, se estimó adecuado emplear un valor de 0.07.

Por otro lado, se realizaron varias simulaciones con el objetivo de estudiar el impacto de emplear distintos mapas de **rugosidad de la superficie** basados en diferentes fuentes (Base de datos del modelo KINEROS, Woolhiser et al., 1990; McCUEN, 1998) y tras comprobar que los modelos apenas variaban, se optó por establecer los valores definidos en McCUEN, los cuales se establecen en función del uso Sigpac (Tabla 2-28).

Uso	Valor n Manning
Invernaderos	0.01
Edificación, Zona urbana, Carretera	0.012
Tierra arable	0.04
Pastos	0.08
Forestal	0.4

Tabla 2-28. Valores del Coeficiente de Manning empleados en el modelo.

2.4.4.2. CALIBRACION DE LOS PARAMETROS RELACIONADOS CON LA CALIDAD DEL AGUA

La calibración de los parámetros que condicionan el ciclo del nitrógeno, debido a que no se dispone de medidas de concentración de N distribuidas en la zona de estudio, se llevó a cabo mediante el estudio de dos variables, fundamentalmente: la exportación de nitrógeno a través del punto de salida de la cuenca (durante el periodo 28-Oct-2009/31-Ago-2010) y la cuantificación del proceso de desnitrificación a una escala global.

A pesar de que se consideró que el módulo Sediment Quality llevaba a cabo una aproximación bastante realista de la transformación de nutrientes debido a la simulación explícita de los reservorios de microorganismos (anaeróbico, aerobicos y heterótrofos), su uso nos llevaba a la necesidad de tener que especificar un gran número de variables, las cuales, a falta de datos de campo, se convertían en un gran número de parámetros a calibrar. Además, aunque se consideró la posibilidad de elegir únicamente la simulación del ciclo del nitrógeno mediante este módulo, el código no permitía esta selección, y era necesario simular cada ciclo de nutrientes incluyendo el carbono, fósforo y nitrógeno, con la consecuente relentización de las simulaciones, algo que para los medios disponibles, se convertía en un procedimiento inviable.

Así, en la presente Tesis Doctoral se descartó el uso del módulo Sediment Quality basándose en las siguientes razones:

- La cantidad de datos necesarios para definir las tasas de transformación no están disponibles, convirtiéndose en datos a calibrar que traerían consigo una gran incertidumbre.
- La imposibilidad de realizar un balance de masas a nivel global y obtener las tasas de transformación generales (tasas que aparecen son simuladas en otros modelos) no permite que los valores de las tasas simuladas puedan ser fácilmente calibrados.
- El hecho de que no sea posible simplificar las propiedades simuladas, hace que sea obligatorio la simulación de todos los reservorios, y la simulación del transporte de todos ellos ralentiza de una forma considerable el tiempo de simulación.
- La aparición de errores numéricos (relacionados con el agotamiento de ciertas propiedades).

En su lugar se ha empleado la simplificación de la formulación propuesta por Peyrard et al., (2011).

Hay que destacar que la simulación de la desnitrificación ha sido una implementación relativamente nueva en el código y que, por lo tanto, la obtención del valor de desnitrificación anual a nivel de cuenca sólo ha sido posible en las últimas simulaciones realizadas. Además, el hecho de no disponer de medidas de concentración de DOC (carbono orgánico disuelto) y POC (carbono orgánico particulado) distribuidas espacial y temporalmente, hace que la calibración de la tasa de degradación del POC y DOC (K_{POC} y K_{DOC} , respectivamente), quede centrada únicamente en la simulación del N.

Así, el primer paso realizado consistió en estudiar los resultados obtenidos del modelo inicial, al cual se habían asignado los valores de las tasas de degradación de POC (K_{POC}) y DOC (K_{DOC}) y la constante de semisaturación del nitrato (K_{NO_3}) de acuerdo con Peyrard et al., 2011 (Tabla 2-29).

Con los valores iniciales se obtuvo una degradación muy lenta del POC a lo largo de la simulación y un rápido consumo del DOC, llegando a su total agotamiento en el acuífero en cuatro días. Como este modelo no considera nuevas entradas de carbono disuelto ni particulado durante la simulación, se pensó oportuno establecer tasas bajas de degradación que simulasen un descenso muy lento de la concentración de estos compuestos, y se calibró el valor de K_{NO_3} en función de la exportación de nitrógeno y valor global de desnitrificación. En la literatura este parámetro coge un amplio rango de valores, que oscilan entre 0.02 mg N l⁻¹ (Hareendran et al., 2009) a 30 mg N l⁻¹ (Peyrard et al., 2011).

Parámetro	Descripción	Unidad	Valor inicial	Valor calibrado
K_{POC}	Tasa de degradación del POC	d ⁻¹	0.0001	0.0001
K_{DOC}	Tasa de degradación del DOC	d ⁻¹	0.68	0.00001
K_{NO_3}	Constante de semisaturación de NO ₃	mg N l ⁻¹	30	1

Tabla 2-29. Parámetros relacionados con el proceso de desnitrificación.

Un aspecto a considerar en relación al **carbono orgánico particulado** es la asunción de que el 50% del carbono orgánico total medido en campo (Muñoz, 2012) es el equivalente a la fracción refractaria, la cual es la que se degrada más fácilmente y, al fin y al cabo, repercute sobre el ciclo del N. A pesar de que en el modelo de Peyrard no se distingue entre las fracciones *lábil* y *refractaria*, el hecho de que modelos como RZWQM (Root Zone Water Quality Model) y, por lo tanto, la formulación del módulo Sediment Quality, se basen en la actividad microbiana distinguiendo los reservorios *lábil* y *refractario* de un gran número de compuestos, hizo que en el presente estudio no se considerase la cantidad total de carbono para caracterizar el reservorio POC del modelo. En su lugar, se consideró el 50% del carbono total medido en campo (de acuerdo con la literatura, la fracción estable de la cantidad total del carbono orgánico del suelo puede variar en un rango de 15-60; Falloon y Smith, 2000). No obstante, esta caracterización, al igual que la distribución espacial del contenido de POC inicial definida en el modelo, son simplificaciones necesarias tomadas por la ausencia de un mayor número de datos de campo que contribuyen, en cierta medida, a la incertidumbre que caracteriza los modelos de este tipo. Efectivamente, la necesidad de caracterizar adecuadamente la fracción de la materia orgánica con una baja tasa de degradación para los estudios de modelización, ya fue destacada a principios de los 90 cuando empezaron a utilizarse modelos en los que se contemplaba el carbono orgánico del suelo (Skjemstad et al., 1996).

La concentración inicial del **carbono orgánico disuelto** fue asignada constante a lo largo del perfil vertical del acuífero de acuerdo con el valor medio obtenido en el río Alegria por Cerro (2013). Si bien los cambios de concentración registrados en el río bajo diferentes condiciones hidrológicas pueden ser atribuidos a orígenes más o menos superficiales del agua subterránea, siendo mayor la concentración registrada durante las crecidas debido a un mayor aporte de aguas menos profundas y de mayor concentración, en este estudio tuvo que emplearse un único valor simplificado por no disponer de medidas de concentración distribuidas en las aguas subterráneas. Se asignó, además, una tasa de degradación del DOC tal que su concentración se mantuviese constante durante la simulación.

Otro aspecto de gran importancia en cuanto a la simulación del ciclo del nitrógeno se refiere, es la consideración de los principales procesos contribuyentes al mismo. Concretamente, el hecho de que la formulación de Peyrard et al., (2011), no considere la mineralización del nitrógeno hizo que se tuviese que definir como si fuese una entrada de fertilización al sistema.

En un principio, se analizaron los resultados que había dado el modelo SWAT (Segundo modelo), los cuales estimaban para el periodo 2009-2011 una mineralización anual media de 137 kg N ha⁻¹. Tras obtener un valor medio mensual y definirlo como una entrada de nitrógeno establecida mensualmente en cada celda, se comprobó que la exportación de nitrógeno aumentaba excesivamente, lo cual se vinculó a un aporte repentino que traía una rápida lixiviación de la zona radicular sin que diese lugar a la absorción del nitrógeno por parte de la vegetación. Así, la posterior prueba consistió en una definición semanal, correspondiente a un valor semanal de la cantidad anual media. Se comprobó que la exportación de N disminuía considerablemente, con lo que se estimó oportuno introducir el valor simulado de nitrógeno a un paso temporal diario. No obstante, el archivo creado resultó ser demasiado grande por lo que MOHID no consiguió leerlo. Se intentó también definir la mineralización en forma de

fertilización diaria continua, pero tampoco resultó satisfactoria. Por este motivo, se optó por dejar el valor de la mineralización definido a nivel semanal cuantificado en 2.6 kg N ha⁻¹.

A pesar de que a nivel anual la mineralización establecida pueda resultar algo sobreestimada (considerando los valores obtenidos en una parcela de la misma zona de estudio, 92-123 kg N ha⁻¹ año⁻¹ de acuerdo con Ortuzar, 2007), se comprobó que su valor estaba dentro de rangos aceptables para tierras arables (40-180 kg N ha⁻¹ año⁻¹ según Krysanova et al., 2002).

Mencionar, también, que la metodología de Peyrard tampoco contempla el proceso de volatilización. A pesar de que en la zona es común la fertilización de cobertera con fertilizantes nitrato amoniacales, la pérdida de N a través de la volatilización se cree insignificante (Janzen y Ellert, 1998).

Por último, en cuanto al transporte de nutrientes se refiere, es necesario mencionar que en el presente estudio sólo se ha simulado el flujo advectivo ya que se considera que este tipo de transporte es el mayoritario en los acuíferos (Dogan et al., 2014).

2.5. CONSTRUCCIÓN DE LOS ESCENARIOS CON BUENAS PRÁCTICAS AGRÍCOLAS

Existen numerosos estudios sobre las Buenas Prácticas Agrícolas, *Best Management Practices* (**BMP**), en la literatura (D'Arcy y Frost, 2001; Liu et al., 2013; Moriasi et al., 2013). Estos estudios surgieron, principalmente, con el objetivo de ayudar a los planes de gestión agrícola y a las leyes medioambientales, estando generalmente enfocados a la contaminación agrícola por nitrato, fósforo y plaguicidas (Logan, 1993). El concepto de las BMPs considera los siguientes elementos clave: **necesidad de orientación** que ofrezca opciones prácticas de prevención, **definición** de la práctica de una forma precisa y que la práctica esté basada en **experiencia e investigación** (D'Arcy y Frost, 2001).

Las BMPs están agrupadas en tres grupos principales, los cuales corresponden al grupo de las prácticas **estructurales**, el de las prácticas asociadas a las **costumbres** de una zona y el de las prácticas de **gestión**. En la Figura 2-48 se muestran las principales BMPs así como el principal objetivo medioambiental al que están enfocadas, el tipo de contaminante que evalúan y el medio sobre el que tienen un impacto medioambiental.

Dado que la mayor parte de la contaminación por nitratos tiene un origen difuso, se piensa que el estudio de las prácticas agrícolas con objetivo de disminuir las pérdidas de nitratos es fundamental a la hora de desarrollar planes de gestión medioambiental. Si bien es cierto que este estudio puede llevarse a cabo mediante experimentos de campo si éste está enfocado en los efectos locales, se piensa que las BMPs deben evaluarse sobre una escala mayor, algo para lo que los modelos son considerados realmente útiles (Bouraoui y Grizzetti, 2014).

No obstante, entre todos los códigos disponibles, los cuales difieren en cuanto su representación de los procesos, escala temporal y escala espacial (en definitiva, su complejidad), lógicamente, es necesario escoger aquel que permita simular el proceso que va a ser evaluado.

BMP	Primary environmental objective ¹	Pollutant type ²	Medium impacted ³			
			Surface water	Ground water	Air	Soil
<i>Structural</i>						
Terraces, hillside ditches	E	E, P	P	N/A	N	P
Grass waterways	E	E, P	P	N	N	P
Subsurface (tile) drains, water table management	S	E, P, N, S	P/A	P	N	P
Irrigation systems	S, E	S, N	P	P	P	P
Chemigation backsiphon devices	Q	C, N	N	P	N	N
Sediment and water retention basins	L, Q	E, P, N	P	A	A	N
Surface drains	N, Q	N	A	P	N	P
Manure storage, run-off control, filter strips	W, L, Q	N, P, B, O, M	P	P	P	P
Irrigation tailwater recovery systems	E	E, C, S	P	N	N	P
<i>Cultural</i>						
Conservation tillage	E, L, Q	E, P	P	N/A	N/A	P
Contour cropping	E, L	E	P	N/A	N	P
Stripcropping	E, L	E	P	N/A	N	P
Contour stripcropping	E, L	E	P	N/A	N	P
Cover cropping	E, L, Q	E	P	P	N	P
Crop rotation	E	E	P	N/P	N	P
Subsoiling	S	S, E	P	N/A	N	P
Land grading	S, E	S, E	A	N/P	N/P	P
Critical area planting	E, L, Q	E, P, N	P	P	P	P
Stream bank protection	E	E	P	N/P	N/P	P
Low input farming	E, L, Q	E, C	P	N/P	P	P
<i>Management</i>						
Integrated pest management	Q	C, M	P	P	P	P
Animal waste management	L, W, Q	N, P, M	P	P	P	P
Fertilizer management	L, Q	N, P	P	P	P	P
Pesticide management	Q	C, M	P	P	P	P
Irrigation management	S, L, Q	S, N, P	P	P	P	P

¹E, erosion control; L, eutrophication; W, animal waste management; Q, water quality; S, salinity; N, none, for example, surface drains primarily eliminate wetness problems.

²E, sediment; P, phosphorus; N, nitrogen; C, pesticide; B, biological oxygen demand; S, salt; M, heavy metals; O, pathogenic organisms.

³P, positive impact; A, adverse impact; N, no impact.

Figura 2-48. Clasificación de las Buenas Prácticas Agrícolas (Logan, 1993).

En el presente trabajo, se han evaluado mediante los modelos SWAT y MOHID el impacto medioambiental de un escenario basado en las tendencias actuales (las cuales muestran una progresiva pérdida de la extensión ocupada por cultivo de regadío, como se ha explicado en el apartado 2.1.3. *Usos del suelo*) y de otro que puede ayudar a comprender la importancia de aplicar las medidas de control cuanto antes. Para ello, se han tomado un modelo SWAT y otro MOHID como base, denominados SWAT BASE y MOHID BASE, respectivamente, y se han definido dos escenarios BMPs considerando en cada en cada caso:

- (i) la reducción del 20% de cada aplicación de fertilizantes; escenarios denominados en cada caso, SWAT FERT y MOHID FERT, y
- (ii) la total desaparición de los cultivos de regadío (patata y remolacha) y la ocupación de su extensión por cereales habituales (trigo) manteniendo las mismas dosis de

fertilizantes que en los modelos base; escenarios denominados en cada caso, SWAT USO y MOHID USO.

Si bien es cierto que de los dos métodos numéricos empleados el modelo SWAT es el que da más opciones a la hora de estudiar el impacto de BMPs, en este caso es el único que permite simular la práctica del riego, se ha optado por emplear también el modelo MOHID debido a dos razones, fundamentalmente. La primera, la inexistencia de estudios de BMPs mediante el código MOHID; y la segunda, el interés por comparar los resultados de ambos modelos, también en este ámbito de los escenarios.

En este punto, es necesario aclarar que el modelo SWAT empleado como **modelo base**, es decir, el modelo con el que se han comparado los resultados de los modelos en los que se han implementado las BMPs, ha sido el obtenido de la modelización del impacto de las prácticas agrícolas tras solucionar el problema numérico relacionado al ejecutable SWAT-2009 (apartado 3.1.5. *Corrección de errores numéricos*). Para el propósito de estudiar las BMPs se ha escogido este modelo por ser el que mejor representa la evolución de la concentración de nitrato en el acuífero, algo en lo que se ha querido enfocar el impacto de las BMPs establecidas, además de la exportación de carga de N y de la producción agrícola. Además de analizar los efectos medioambientales que pueden acarrear los escenarios BMPs, es de gran importancia analizar también su impacto sobre la producción agrícola, pues al fin y al cabo, las instituciones también deben considerar su efecto para implementar estrategias de gestión. En cuanto a MOHID se refiere, mencionar que el modelo empleado como base es el único expuesto en el apartado de los resultados (apartado 4.2. *Differences in watershed scale processes modeling by a physics-based model and a conceptual model*).

En cualquier caso, es importante aclarar que cada uno de los escenarios BMPs ha sido implementado al inicio del año 2008 con el objetivo de dejar un año de calentamiento (o *warm up*) y poder analizar las variables simuladas para el periodo 2009-2011.

2.6. REFERENCES

- 261/1996 Real Decreto, de 16 de febrero, sobre protección de las aguas contra la contaminación producida por los nitratos procedentes de fuentes agrarias.
- 390/1998 Real Decreto, de 22 de diciembre, por el que se dictan normas para la declaración de zonas vulnerables a la contaminación de las aguas por los nitratos procedentes de la actividad agraria y se aprueba el código de buenas prácticas agrarias de la comunidad autónoma del País Vasco.
- 91/676/EEC, 1991. Directiva 91/676/EEC, relativa a la protección de las aguas contra la contaminación producida por nitratos procedentes de fuentes agrarias.
- Braunschweig, F., Leitao, P.C., Fernandes, L., Pina, P. and Neves, R.J.J., 2004. The object-oriented design of the integrated water modelling system MOHID. Proceedings of the XV international conference on computational methods in water resources, 2: 1079-90.
- Braunschweig, F., Fernandes, L. y Lourenco, F., 2011. MOHID Studio User guide. Action modulers. www.actionmodulers.pt
- Aguilar, C. and Polo, M.J., 2005. Análisis de sensibilidad de AnnAGNPS en la dinámica de herbicidas en cuencas de olivar. Estudios de la zona no saturada del suelo, 7: 337-343.

- Ahuja, L. R., Hanson, J. D., Rojas, K. W. and Shaffer M. J., 1999. The Root Zone Water Quality Model. Water Resources Publications LLC. Highlands Ranch, EEUU. pp. 372.
- Allen, R.G., Pereira, L.S., Raes, D. and Smith, M., 1998. Crop evapotranspiration- Guidelines for computing crop water requirements- FAO Irrigation and drainage paper 56. Electronic document. Rome. pp. 174.
- Arnold, J., Srinivasan, R., Muttiah, R. and Williams, J., 1998. Large-area hydrologic modeling and assessment: Part I. Model development. *Journal of American Water Resource Association*, 34: 73-89.
- Arrate, I., 1994. Estudio hidrogeológico del acuífero cuaternario de Vitoria-Gasteiz (Araba, País Vasco). Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Arrate, I., Morell, I. and Antigüedad, I., 1992. Contaminación por nitratos en el acuífero cuaternario de Vitoria-Gasteiz. Distribución espacial y evolución temporal. *Hidrogeología y Recursos Hidráulicos*, 16: 127-143.
- Arrate, I., Sánchez-Pérez, J.M., Antigüedad, I., Vallecillo, M.A., Iribar, V., and Ruiz, M., 1997. Groundwater pollution in Quaternary aquifer of Vitoria-Gasteiz (Basque Country, Spain). *Environ. Geol.*, 30: 257-265.
- Boithias, L., 2012. Modelisation des transferts de pesticides a l'échelle des bassins versants en période de crue. Thesis (PhD). Toulouse, INPT.
- Boswell, V.G., 1926. The influence of temperature upon the growth and yield of garden peas. *Journal of the American Society for Horticultural Science*, 23: 162-168
- Bouraoui, F. and Grizzetti, B., 2014. Modelling mitigation options to reduce diffuse nitrogen water pollution from agriculture. *Science of the total environment*, 468-469: 1267-1277.
- Brooks, R.H. and Corey, T., 1964. Hydraulic properties of porous media. *Hydrology papers*. Colorado, EEUU. pp. 27.
- Cartwright, K. and Hensel, B.R., 1995. Hydrogeology-basic principles. In: *Geotechnical Practice for Waste Disposal* Daniel, D.E.(Ed.). Chapman & Hall. pp. 677.
- Cerro, I., 2013. Impacto de las crecidas en la calidad del agua (Cuenca agrícola del río Alegria, País Vasco). Aplicación del modelo agro-hidrológico SWAT. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Chapra, S.C., 1997. *Surface water quality modeling*. McGraw Hill. Nueva York, EEUU. pp. 844.
- Cho, J., Lowrance, R.R., Bosch, D.D., Strickland, T.C., Her, Y. and Vellidis, G., 2010a. Effect of watershed subdivision and filter width on SWAT simulation of a coastal plain watershed. *Journal of the American Water Resources Association*, 46(3): 586-602.
- Cho, J., Vellidis, G., Bosch, D.D., Lowrance, R. and Strickland, T., 2010b. Water quality effect of simulated conservation practice scenarios in the Little River experimental watershed. *Journal of soil and water conservation*, 65(6): 463-473.
- Chow, V.T., 1959. *Open Channel Hydraulics*. McGraw-Hill. New York, EEUU. pp. 700.
- Custodio, E. and Llamas, M.R., 1983. *Hidrología Subterránea*. Ediciones Omega. Barcelona, España. pp. 2350.
- D'Arcy, B. and Frost, A., 2001. The role of best management practices in alleviating water quality problems associated with diffuse pollution. *The Science of the Total Environment*, 265: 359-367.
- Darcy, H., 1856. *Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon*. Dalmont, France. pp. 647.
- Debele, B., Srinivasan, R. and Parlange, J.Y., 2009. Hourly analyses of hydrological and water quality simulations using the ESWAT Model. *Water Resources Management*, 23: 303-324.
- Dogan, M., van Dam, R.L., Liu, G., Meerschaert, M.M., Butler, J.J., Bohling, G.C., Benson, D.A. and Hyndman D.W., 2014. Predicting flow and transport in highly heterogeneous alluvial aquifers. *Geophysical Research Letters*, 41: 7560-7565.
- Epelde, A.M., Cerro, I., Sánchez-Pérez, J.M. Sauvage, S., Srinivasan, R. and Antigüedad, I., 2015. Application of the SWAT model to assess the impact of changes in agricultural management practices on water quality. *Hydrological Sciences Journal*, 60(5): 1-19.
- EVE, 1996. Mapa hidrogeológico del País Vasco a escala 1:100000. Ente Vasco de la Energía. pp. 377.
- Falloon, P.D. and Smith, P., 2000. Modelling refractory soil organic matter. *Biology and fertility of soils*, 30: 388-398.

- Feddes, R.A., Kowalik, P.J. and Zaradny, H., 1978. Simulation of field water use and crop yield. Pudoc, Wageningen. Simulation Monographs.
- Feddes, R. A., and P. A. C. Raats, 2004: Parameterizing the soil-water-plant root system. Unsaturated-Zone Modeling: Progress, Challenges and Applications: Papers for the Frontis Workshop, R. A. Feddes, G. H. de Rooij, and J. C. van Dam, Eds., Kluwer Academic, 95–141
- Freeze, R.A. and Cherry, J.A., 1979. Groundwater. Prentice Hall. Michigan, EEUU. pp. 604.
- Gallart, F., Latron, J., Llorens, P. and Beven, K., 2007. Using internal catchment information to reduce the uncertainty of discharge and baseflow predictions. *Advances in water resources*, 30: 808-823.
- Gassman, P.W., Reyes, M.R., Green, C.H. and Arnold, J.G., 2007. The soil and water assessment tool: historical development, applications and future research direction. *Transactions of the ASABE*, 50(4): 1211-2150.
- Green, C.H., Tomer, M.D., Di Luzio, M. and Arnold, J.G., 2006. Hydrologic evaluation of the soil and water assessment tool for a large tile-drained watershed in Iowa. *Transactions of the ASABE*, 49(2): 413–422.
- Gupta, H. V., Sorooshian, S. and Yapo, P. O., 1999. Status of automatic calibration for hydrologic models: Comparison with multilevel expert calibration. *Journal of Hydrologic Engineering*, 4(2): 135-143.
- Hareendram, R., Salam, N., Riffat, R., Bott, C., Takacs, I. and Murthy, S., 2009. Investigation of the nitrate half saturation constant for denitrification at the Blue Plains AWTP. *Proceedings of the Water Environment Federation, Nutrient Removal*. pp. 277-285.
- IGM- Instituto Geológico y Minero Español, 1971. Estudio hidrogeológico del Cuaternario de Vitoria. Mem. Inéd.
- IGME- Instituto Geológico y Minero Español, 1986. Proyecto para el análisis de focos de contaminación, evolución y efectos en la Unidad Cuaternaria de Vitoria. Mem. Inéd.
- Iñiguez, J., Sánchez-Carpintero, I., Val, R.M., Romeo, A. and Bascones, J.C., 1980. Mapa de suelos de Alava. Vitoria-Gasteiz: Diputación Foral de Alava-Departamento de Edafología de la Universidad de Navarra.
- Izaurre, R.C., Williams, J.R., McGill, W.B., Rosenberg, N.J. and Quiroga Jakas, M.C., 2006. Simulating soil C dynamics with EPIC: Model description and testing against long-term data. *Ecological Modeling*, 192(3-4): 362-384.
- Janzen, H.H. and Ellert, B.H., 1998. Sulfur dynamics in cultivated its dynamics in terrestrial ecosystems. *Temperate agroecosystems*. In: Maynard, D.G. (ed.). *Sulfur in the environment*. CRC Press. New York, EEUU. pp. 384.
- Jégo, G., Martínez, M., Antigüedad, I., Launay, M., Sanchez-Pérez, J.M. and Justes, E., 2008. Evaluation of the impact of various agricultural practices on nitrate leaching under the root zone of potato and sugar beet using the STICS soil-crop model. *Sciences of the total environment*, 374: 207-221.
- Jenny, H., 1941. *Factors of soil formation*. Dover Press. New York, EEUU. pp. 320.
- Jeong, J., Kannan, N., Arnold, J.G., Glick, R., Gosselink, L., Srinivasan, R. and Harmel, R.D., 2011. Development of Sub-Daily erosion and sediment transport algorithms for SWAT. *Transactions of the ASABE*, 54(5): 1685-1691.
- Jong van Lier, Q., van Dam, J.C., Metselaar, K., Jong, R. and Duijnsveld, W.H.M., 2008. Macroscopic Root Water Uptake Distribution Using a Matric Flux Potential Approach. *Vadose zone journal*, 7: 1065-1078.
- Knisel, W.G., 1980. 'CREAMS: A Fieldscale Model for Chemical, Runoff, and Erosion from Agricultural Management Systems,' USDA, Science and Education Administration, Conservation Report No. 26, Washington, EEUU.
- Krysanova, V. and U. Haberlandt, 2002. Assessment of nitrogen leaching from arable land in large river basins. Part I. Simulation experiments using a process-based model. *Ecological modeling*, 150: 255-275.
- Leonard, R.A., Knisel, W.G. and Still, D.A., 1987. GLEAMS: Groundwater loading effects of agricultural management systems. *Transactions of the ASAE*, 30: 1403-1418.
- Liu, R., Zhang, P., Wang, X., Chen, Y. and Shen, Z., 2013. Assessment of effects of best management practices on agricultural non-point source pollution in Xiangxi River watershed. *Agricultural Water Management*, 117: 9-18.
- Logan, T.J., 1993. Agricultural best management practices for water pollution control: current issues. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 46: 223-231.

- Macalister, L.S., 2010. Comparison of a watershed model (SWAT) and a groundwater flow model (GFLOW) to simulate the hydrology of two agricultural watersheds in Iowa. Graduate Theses and Dissertations. Iowa State University. pp. 252.
- Maharjan, G.R., Park, Y.S., Kim, N.W., Shin, D.S., Choi, J.W., Hyun, G.W., Jeon, J.H., Ok, Y.S. and Lim, K.J., 2013. Evaluation of SWAT sub-daily runoff estimation at small agricultural watershed in Korea. *Frontiers of Environmental Science and engineering*, 7(1): 109-119.
- Martínez López de Sabando, M., 2012. Caracterización hidrodinámica e hidroquímica del Humedal de Salburua (Álava, País Vasco). Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Martinez, M., 2008. Dinámica espacio-temporal de la calidad de las aguas de la Zona Vulnerable de Vitoria-Gasteiz (País Vasco). Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- McCuen, R.H., 1998. *Hydrologic Analysis and Design*. Prentice Hall. Michigan, EEUU. pp. 814.
- Medina, A., Galarza, G. and Carrera, J., 1989. Manual del Programa TRANSIN II. Simulación y estimación de parámetros de flujo y transporte en medios porosos. E.T.S.I. Caminos, Canales y Puertos. Universidad Politécnica de Catalunya. 132 pp.
- Moriasi, D.N., Arnold, J.G., Van Liew, M.W., Bingner, R.L., Harmel, R.D. and Veith, T.L., 2007. Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations. *Transactions of the ASABE*, 50(3): 885-900.
- Moriasi, D.N., Gowda, P.H., Arnold, J.G., Mulla, D.J., Ale, S. and Steiner, J.L., 2013. Modeling the impact of nitrogen fertilizer application and tile drain configuration on nitrate leaching using SWAT. *Agricultural Water Management*, 130: 36-43.
- Mott, R., 1996. *Mecánica de fluidos aplicada* (4ª edición). Pearson. México. pp. 580.
- Mualem, Y., 1976. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water resources research*, 12: 513-522.
- Muñoz, B., 2012. Impacto de fertilizantes y pesticidas en la calidad del suelo y el agua. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Nash, J.E. and Sutcliffe, J.V., 1970. River flow forecasting through conceptual models part I: a discussion of principles. *Journal of Hydrology*, 10: 282-290.
- Neitsch, S.L., Arnold, J.G., Kiniry, J.R. and Williams, J.R., 2009. *Soil and Water Assessment Tool user's manual version 2009*. Available in: wwwswat.tamu.edu.
- Neves, R.J.J., 1985. Etude experimentale et modelisation des circulations transitoire et residuelle dans l'Estuaire du Sado. Thesis (PhD). University of Liege.
- Orang, M.N., Snyder, R.L., Geneg, S., Hart, Q.J., Sarreshteh, S., Falk, M., Beaudette, D., Hayes, S. and Eching, S., 2013. California Simulation of evapotranspiration of applied water and agricultural energy use in California. *Journal of Integrative Agriculture*, 12(8): 1371-1388.
- Ortuzar, M.A., 2007. Desarrollo de un sistema de fertilización nitrogenada racional en trigo blando de invierno bajo condiciones de clima mediterráneo húmedo. Thesis (PhD). University of the Basque Country-Neiker.
- Oyarzun, R., 2007. Transporte de contaminantes en aguas subterráneas. *Temas Ambientales*. CEAZA, Chile. Mem. Inéd.
- Peyrard, D., Delmotte, S., Sauvage, S., Namour, P., Gerino, M., Vervier, P. and Sanchez-Perez, J.M., 2011. Longitudinal transformation of nitrogen and carbon in the hyporheic zone of an N-rich stream: A combined modeling and field study. *Phys. Chem. Earth*, 36, 599-611.
- Refsgaard, J.C., 1997. Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models. *Journal of Hydrology*, 198: 69-97.
- Runkel, R. L., C. G. Crawford, and T. A. Cohn. 2004. Load Estimator (LOADEST): A FORTRAN Program for Estimating Constituent Loads in Streams and Rivers. U.S. Geological Survey Techniques and Methods Book 4. pp. 69.
- Sánchez-Pérez, J.M., Bouey, C., Sauvage, S., Teissier, S., Antiguada, I. and Vervier, P., 2003. A standardised method for measuring in situ denitrification in shallow aquifers: numerical validation and measurements in riparian wetlands. *Hydrology and Earth System Sciences*, 7(1): 87-96.

- Sangrey, D.A., Harrop-Williams, K.O. and Klaiber, J.A., 1984. Predicting ground-water response to precipitation. *ASCE Journal of Geotechnolgy Engineering*, 110(7): 957-975.
- Saxton, K.E. and Rawls, W.J., 2009. Soil Water Characteristics: Hydraulic properties calculator [Computational program]. USDA Agricultural Research Service. Version 6.02.74.
- Schaap, M.G., and F.J. Leij, 1998. Database Related Accuracy and Uncertainty of Pedotransfer Functions, *Soil Science*, 163:765-779.
- SCS, Soil conservation service, 1972. Section 4: Hydrology. In: *National Engineering Handbook*. SCS.
- Seligmand, N.G. and van Keulen, H., 1981. PAPRAN: A simulation model of annual pasture production limited by rainfall and nitrogen. In: Frissel, M.J. and van Veed, J.A. (Eds.). *Simulation of nitrogen behavior of soil-plant systems*. pp. 192-221. Workshop. Wageningen, The Netherlands. Jan-Feb 1980.
- Sels, H., 2009. Modelling the impact of emission reduction measures with SWAT for the Grote Nete river. Master Thesis. University College West Flanders.
- Skjemstad, J.O., Clarke, P., Taylor, J.A., Oades, J.M. and McGuire, S.G., 1996. The chemistry and. *Australian journal of soil research*, 34: 251-271.
- Smedema, L.K. and Rycroft, D.W., 1983. *Land drainage-planning and design of agricultural drainage systems*. Cornell University Press. Ithaca, EEUU. pp. 288.
- Snyder, R.L., Bali, K., Ventura, F. and Gomez-MacPherson, H., 2000. Estimating evaporation from bare or nearly bare soil. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, 126: 399-403.
- Snyder, R.L., Orang, M., Matyac, S. and Eching, S., 2007. *Crop Coefficients*. UC Davis Biometeorology Program. Electronic document. pp. 14.
- Stroonsnijder, L., 1987. Soil evaporation: test of a practical approach under semi-arid conditions. *Netherlands Journal of Agricultural Science*, 35: 417-426.
- Trancoso, A.R., Braunschweig, F., Chambel Leitao, P., Obermann, M. and Neves, R., 2009, An advanced modeling tool for simulating complex river systems. *Sci. Total Environ.*, 407, 3004-3016. DOI:10.1016/j.scitotenv.2009.01.015.
- Twarakavi, N.K.C., Sakai, M. and Simunek, J., 2009. An objective analysis of the dynamic nature of field capacity. *Water Resources Research*, 45: 1-9.
- Van Genuchten, M.T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil. Sci. Soc. Am. J.* 44: 892-898.
- van Griensven, A. and Bauwens, W., 2005. Application and evaluation of ESWAT on the Dender Basin and Wister Lake Basin. *Hydrological Process*, 19(3): 827-838.
- van Liew, M.W. and Garbrecht, J., 2003. Hydrologic simulation of the little Washita river experimental watershed using SWAT. *Journal American Water Resources Association*, 39(2): 413-426.
- Veith, T.L. and Ghebremichael, L.T., 2009. How to: applying and interpreting the SWAT Auto-Calibration tools. *International SWAT Conference*. Chiang Mai, Thailand. 5-7 August.
- Ventura, F., Snyder, R.L. and Bali, K.M., 2006. Estimating evaporation from bare soil using soil moisture data. *Journal of Irrigation and Drainage Engineering*, 132: 153-158.
- Wallis, K.J., Candela, L., Mateos, R.M. and Tamoh, K., 2011. Simulation of nitrate leaching under potato crops in a Mediterranean area. Influence of frost prevention irrigation on nitrogen transport. *Agricultural Water Management*, 98: 1629-1640.
- Williams, J.R., 1990. The erosion productivity impact calculator (EPIC) model: A case history. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 329: 421-428.
- Woolhiser, D.A., Smith, R.E. and Goodrich, D.C. 1990. *KINEROS, A Kinematic Runoff and Erosion Model: Documentation and User Manual*. U S. Department of Agriculture, Agricultural Research Service. pp. 130.
- Zhang, K., Hiltton, H.W., Greenwood, D.J. and Thompson, A.J., 2011. A rigorous approach of determining FAO56 dual crop coefficient using soil sensor measurements and inverse modeling techniques. *Agricultural Water Management*, 98: 1081-1090.

Otras Fuentes:

www.epa.ohio.gov. United States Environmental Protection Agency. Accessed on 14-Oct-2014.

www.mohid.com. MOHID web page. Accessed during 2011-2014.

www.euskalmet.euskadi.net. Agencia Vasca de Meteorología, Euskalmet. Accessed on June 2011.

3.



MODELIZACIÓN INTEGRADA DE PROCESOS HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD MEDIANTE UN MODELO CONCEPTUAL

- 3.1. RESULTADOS Y DISCUSIÓN: MODELIZACIÓN DEL IMPACTO DE LAS PRÁCTICAS AGRÍCOLAS CON SWAT
- 3.2. RESULTADOS Y DISCUSIÓN: MODELIZACIÓN DEL NIVEL FREÁTICO CON SWAT
- 3.3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN: REPRESENTACIÓN DE LA VARIABILIDAD ESPACIAL CON SWAT
- 3.4. CONCLUSIONES SOBRE LA MODELIZACIÓN CON SWAT

3. MODELIZACIÓN INTEGRADA DE PROCESOS HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD MEDIANTE UN CÓDIGO CONCEPTUAL

El presente capítulo recoge los resultados obtenidos de la modelización con SWAT. El objetivo de ésta ha sido estudiar el impacto de las prácticas agrícolas empleadas en la cuenca del río Alegria sobre la calidad de las aguas y los excedentes de nutrientes en el sistema. Así, los resultados que se han ido obteniendo a lo largo del estudio se presentan en función de las etapas de trabajo distinguidas en cuanto a sus objetivos específicos. Se distinguen tres etapas principales orientadas a la modelización del impacto de las prácticas agrícolas, a la modelización del nivel freático y a la representación de la variabilidad espacial, estando la primera de ellas recogida bajo una publicación en una revista internacional (JCR).

Para concluir este capítulo, son destacadas las principales conclusiones obtenidas con la modelización de la cuenca del río Alegria a través del código SWAT.

3.1. RESULTADOS Y DISCUSIÓN: MODELIZACIÓN DEL IMPACTO DE LAS PRÁCTICAS AGRÍCOLAS CON SWAT

Este apartado ha sido motivo de una publicación en la revista *Hydrological Sciences Journal* (*Special issue: Evaluation of Water Resources with SWAT*), adjunta en el Anexo II y de título: **Application of SWAT model to assess the impact of agricultural management practices changes in water quality**. A continuación, se expone el contenido de la misma así como los resultados obtenidos tras corregir los errores numéricos encontrados en la versión SWAT-2009 del ejecutable empleado.

3.1.1. Introduction

In regions with intense agricultural management, surface water and groundwater are usually affected by anthropogenic pollution resulting from the use of high doses of pesticides and fertilizers and inadequate irrigation techniques. Although in such regions nitrate leaching seems to be an inevitable process, an improvement in management practices leading to a higher N fertilizer use efficiency is thought to reduce the potential for nitrate contamination of groundwater (Bijay-Singh et al., 1995). Nowadays, particular attention is being focused on groundwater quality, especially in regions where it is the main source of drinking water. Current regulations, such as the European Water Framework Directive (EC, 2000), recognize and attempt to address this problem. In fact, there are several hazards related to nitrate pollution of waters, from health hazards linked to consumption of nitrate-bearing water, to the proliferation of toxic algae and hypoxia (Exner et al., 2010).

The environmental impact of agricultural practices depends on many different factors, such as crop type, hydrometeorological conditions (climatology and hydrogeology), crop management practices and soil characteristics (Jégo et al., 2008). Several authors have demonstrated the effect of different land covers on the hydrology of watersheds (Pikounis et al., 2003), a factor that is also directly linked to the nutrient transport within a watershed, especially within the root zone. In lowland watersheds where the water table is quite shallow, groundwater transport plays a key role in the transport of pollutants from the soils into the water system (Wriedt and Role 2006) and, particularly during flood events, streams are at risk of contamination due to the close connection between them and the aquifer (Cerro et al., 2014a).

The Alegria River watershed (Basque Country, Northern Spain) is a lowland area with extensive agricultural land use. It is dominated by a quaternary aquifer with a quite shallow groundwater table, making this watershed especially vulnerable to groundwater pollution (Schmalz et al., 2007 and Lam et al., 2011). Almost the whole study area was designated as a Vulnerable Zone for nitrate pollution from agricultural sources at the end of the 1990s, in line with the European Directive (EC, 1991). With the aim of reducing the pollution, various measures were taken, including the establishment of a Code of Good Practices and changes in the origin of irrigation water. These measures led to a decrease in groundwater N concentration

and, in turn, a decrease in the N concentration in the river. It should also be noted, though, that groundwater concentration has a slow response to fertilizer applied (Exner et al., 2010) and, hence, the decrease in N input to the system was appreciated some time after regulations were introduced. Nowadays, the limit value for nitrates (50 mg L^{-1} according to the European Directive) is exceeded at some points in the aquifer but rarely in the river (Cerro, 2013).

Due to the multiple processes involved in the dynamics of pesticides and fertilizers, modelling is considered extremely valuable as it can help to quantify the pollution, making balances at the scale of the watershed and guiding decisions to improve management (Jégo et al., 2008 and Cerro et al., 2014a). In this study, the SWAT model (Soil and Water Assessment Tool) was used, being considered one of the most useful models for long-term simulation in predominantly agricultural watersheds (Borah and Bera 2003), and robust in predicting nutrient losses at the watershed scale (Gassman et al., 2007, Ferrant et al., 2011 and Cerro et al., 2014a).

There are many studies on nitrate pollution of agricultural watersheds that have been carried out with the SWAT model. They are usually focused on pollution mitigation scenarios by changes in land use (Wang et al., 2008, Ferrant et al., 2013), fertilization doses (Ferrant et al., 2013, Liu et al., 2013, Boithias et al., 2014 and Cerro et al., 2014b) and other management practices, such as the burial of straw, tillage intensity or fertilization dosage (Ferrant et al., 2013, Liu et al., 2013 and Cerro et al., 2014b) by applying a previously calibrated and validated model. Although some studies consider varying conditions on agricultural management obtained from interpolation (Bracmort et al., 2006) or from tools like Land Use Update and Soil Assessment (Koch et al., 2012), most of the studies analyse the effect of alternative scenarios implemented all at once. In any case, calibration and validation of the model are usually performed before the implementation of the scenarios of interest. In this study, however, we simulate varying management practices since the year 1986. Although we calibrate and validate the model for a period in which there is plenty of available field data, we also carry out a validation of other two previous periods, which we consider necessary as the results obtained during them is significant for the conclusion of this work.

The main objectives of this study were to (i) test how well the SWAT model connects nutrient surpluses and groundwater pollution with the river, (ii) perform a long-term (1990-2011) simulation taking into account various changes in agricultural practices to see how nutrient dynamic was affected over the study period; and (iii) assess how well the model simulates the nitrate concentration within the aquifer. The fact that the study period was when important agricultural management changes were registered helps us to identify the aspects which most influence water quality. These aspects should be carefully regarded in the future when new agricultural management legislation is being implemented.

3.1.2. Materials and methods

3.1.2.1 STUDY AREA

The Alegria River watershed (Figure 3-1) is a sub-basin (115 km^2) of the Ebro River basin and it is located in the Basque Country (Northern Spain). The underlying materials in the lowland are Quaternary fluvial and alluvial deposits (a quaternary aquifer) lying over

impermeable marls. The average thickness of the quaternary formation is 5 m. The elevation of the watershed ranges from 506 to 1098 m a.s.l., with a mean of 613 m a.s.l. The average annual precipitation is 650 mm and seasonal variability is significant. Autumn is the rainiest season, registering around 30% of the annual precipitation. High temperature variability is observed on both annual and daily scales (daily means ranging from 0 to 25°C, with changes within a day by as much as 20°C). River discharge was measured at the outlet of the study area. The average discharge in Alegria River for the period 2009-2011 was 0.32 m³ s⁻¹, the annual mean water outflow being 11 hm³. Observed minimum and maximum discharges were 0.02 and 9.55 m³ s⁻¹, respectively. The water of the upper part of the watershed is routed to a reservoir outside the watershed through the Alegria channel (Figure 3-1). This study is focused on the area downstream of the channel (53 km²) as the channel is believed to route all the surface water from the upper part. The alluvial land is characterized by high clay content soils, resulting in a high water retention capacity, a property that makes them suitable for cultivation (Cerro 2013). Approximately 70% of the studied area is in agricultural use, the remaining part being covered by forest and pastures (Table 3-1). The main crops in the area are rainfed grains (wheat, oats and barley) and irrigated sugar beet and potato.

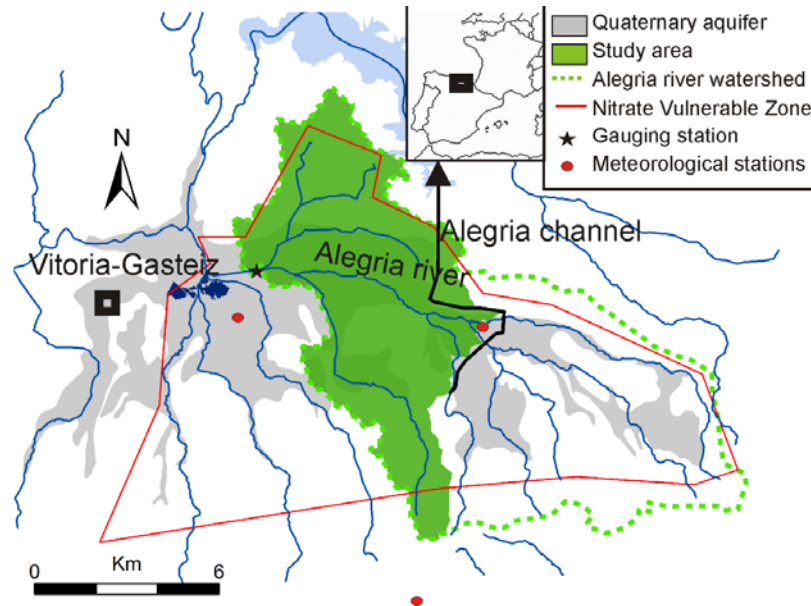


Figure 3-1. Localization of the study area and positions of gauging and meteorological stations in the Alegria River watershed.

Land use type	Area (km ²)	Area (%)
Pasture	3.5	6.6
Deciduous forest	9.2	17.2
Agricultural land	37.1	69.4
Water	0.4	0.8
Urban	3.2	6
	53.4	100

Table 3-1. Land -use classification in the Alegria River watershed.

3.1.2.2. SWAT MODEL DESCRIPTION

The SWAT model is a semi-distributed basin scale model developed by the United States Department of Agriculture (USDA). In this study we used the ArcSWAT interface (ArcSWAT Version 2009.93.7b) for ArcGIS (Winchell et al., 2007). The SWAT model can predict long-term impacts of land use and agricultural management on water (Arnold et al., 1998). It is process-based, operates at daily and monthly time steps and it includes hydrological, chemical, ecological and management practices modules.

The SWAT model divides the watershed into sub-basins connected by a stream network and further delineates each sub-basin into hydrologic response units (HRUs), which consist of unique combinations of land cover, slope and soil type. SWAT simulates each HRU separately and calculates daily water balances. It is assumed that there is no interaction between HRUs (Srinivasan et al., 2010). The model considers multiple hydrological processes occurring in the soil: infiltration, evapotranspiration, percolation into a deeper aquifer and water losses by runoff, as well as lateral and groundwater flow. It also simulates N transport and transformation at HRU scale considering the basic processes of denitrification, volatilization and plant uptake. SWAT distinguishes five different pools for mineral and organic N. Channel water routing can be calculated with different variations of the kinematic wave model. SWAT uses Manning's equation to define the rate and velocity of flow. The water balance components within the reach segment and, in turn, the outflow to the next reach are calculated considering all the losses (via evaporation, transmission, return flow from bank storage and diversions). It is also possible to model nutrient transformations within the channel network. More detailed information about the SWAT model can be found in Neitsch et al. (2011).

The SWAT model has been widely calibrated and validated through the comparison of observed and simulated streamflow data, as well as nutrient and sediment loads at watershed outlets. However, publications related to the vegetation growth module are not so abundant (Nair et al., 2011), despite the fact that its the proper calibration is considered an essential factor for good performance of the model. The importance of the correct simulation of vegetation growth lies in its influence on water and nutrient balances of a system, especially for agricultural watersheds. The SWAT model's crop growth module is based on the Erosion/Productivity Impact Calculator model (EPIC; Williams et al., 1989).

3.1.2.3. INPUT DATA FOR SWAT

The main inputs for the SWAT model are meteorological data, elevation, soil and land-use maps. Meteorological data used were obtained from the Basque Meteorology Agency (Euskalmet) and consist of precipitation, temperature, wind, solar radiation and humidity from three meteorological stations: two (Alegria-C056 and Arkaute-C001) located within the watershed at elevations below 550 m, and the third (Kapildui-C047) at a site about 2 km to the south at an elevation of 1173 m (Figure 3-1). We believe that it is useful to consider meteorological information from this station located outside of the watershed due to the differences in its data (overall, higher precipitation and lower temperatures) compared to those from the other stations. The digital elevation model (LIDAR 2008, 5x5 m) was obtained from the Geoeuskadi website (www.geo.euskadi.net). For each soil represented in the soil map (Iñiguez

et al., 1980) an average texture classification was obtained from the data developed by the Corporation of the Basque Government for the Rural and Marine Environment (HAZI) (Table 3-2). The most dominant soil types in the area are vertisol, cambisol and rendzina, and their general texture has been classified as a combination of loam, silty loam and clay loam, respectively. Aquifer material is characterized by a higher sand content and higher saturated conductivity (Table 3-2). The bulk density (BD), available water content (AWC) and saturated conductivity (Ksat) values were obtained from the Soil Water Characteristics Program developed by the USDA (Saxton and Rawls 2009). From the data provided by the Basque Institute for Agricultural Research and Developmet (Neiker-Tecnalia), organic carbon content (OC) was estimated to be 0.5% for all soil classes. According to the input data, the watershed was discretized into 66 sub-basins and divided into 590 HRUs, created from the combination of three slope classes (0-5, 5-15 and >15%), eight soil types and 17 land uses. The land-use, soil and slope thresholds used for the HRU delineation was 3 ha for all the cases.

Soil type	Layer depth (mm)	Clay (%)	BD (g/cm3)	AWC (vol %)	Ksat (mm/h)	OC (%)
ROccl	1000	29	1.35	17	7.25	0.5
ROCCrc	2000	29	1.35	17	7.24	0.5
CCcvrc	2000	33	1.35	16	5.66	0.5
VCV (1)	1000	25	1.41	15	9.84	0.5
VCV (2)	4000	14	1.41	17	21.36	0.5
Ccrorc	2000	25	1.38	17	9.37	0.5
CCvc	2000	23	1.43	14	11.93	0.5
CV	1000	16	1.45	13	23.36	0.5
Lulro	500	30	1.39	15	6.61	0.5

Table 3-2. Soil classes and main characteristics. ROccl: Ochric Rendzina; ROCCrc: Ochric Rendzina with Calcic Cambisol; CCcvrc, Ccrorc, CCcv: Calcic Cambisol; VCV: Vertisol with Vertic Cambisol (1 and 2, top and bottom layers, respectively); CCvc: Calcic Cambisol with Vertic Cambiso; CV: Vertic Cambisol; and, Lulro: Ortic Luvisol.

In the Alegria River watershed, the majority of the land was devoted to non-irrigated agriculture until the 1950s, but irrigated agriculture had become the dominant practice by 1990s. Arrate et al., (1997) documented that, during this decade, the area occupied by non-irrigated crops was just 15% of that occupied by irrigated crops. However, by the end of the 1990s, the trend had reversed, with the non-irrigated cropland being more abundant than the irrigated land, a pattern that has remained until the present day.

To simulate this variability, areas of irrigated and non-irrigated crops were changed progressively. For the first years of the simulation, irrigated crops were set to occupy most of the arable lands, and the pattern changed through the mid-1990s until the year 2000, since when the distribution has been constant, with non-irrigated crops across the larger part of the arable land. In order to simplify the implementation of the model, from the 17 different land uses, the

two covering the smallest areas were gathered into a single category of “other dominant crops”. Then, regular crop rotations and specific management practices for each crop category (Table 3-3) were established, based on land cover data acquired from Neiker-Tecnalia. Crop rotation and management data are essential aspects of this modelling for obtaining accurate estimations of water and crop yields (Srinivasan et al., 2010). In this study, the following crop rotations were considered:

- Rotation between non-irrigated crops (Wheat/Barley)
- Rotation between irrigated and non-irrigated crops (Barley/Sugar beet/Wheat, Barley/Potato/Wheat and Sugar beet/Wheat).

To interpret the results, the study period was divided into two periods (1990-1999 and 2000-2011) representing different agricultural practices. Specifically, the cut-off year 2000 was established in line with the implementation of the Code of Good Practices, which led to a drop in fertilizer use and a change in the origin of the irrigation water. From the data provided by Neiker-Tecnalia, annual fertilizer input was estimated to be approximately 960 and 680 t year⁻¹ for the first and second periods of the simulation, respectively.

Crop	Cycle	Tillage	Fertilization
Wheat	2 Nov. – 31 Jul.	25 Oct.	25 Jan. (15-15-15) 5 Apr. (Nac 27%)
Winter Barley	2 Nov. – 31 Jul.	25 Oct.	5 Feb. (15-15-15) 5 Apr. (Nac 27%)
Spring Barley	5 Feb. – 31 Jul.	1 Feb.	25 Feb. (15-15-15) 5 Apr. (Nac 27%)
Sugar beet	15 Feb. – 1 Nov.	10 Feb.	10 Feb. (8-15-15) 5 May. (Nac 27%)
Potato	20 Apr.– 20 Oct.	15 Apr.	15 Mar. (7-10-20) 20 May. (Nac 27%)

Table 3-3. Crop cycles and management practices.

Figure 3-2 represents the simulated amounts of top and dressing fertilizer applications. Note the decrease in fertilization over the periods, reflecting the real data. The secondary x - and y -axes represent the estimated nitrate concentration for irrigation water up to the year 2000. In previous decades, pumping water for irrigation was a common practice, a process that led to recirculation of the nitrate from the aquifer. After the implementation of the Code of Good Practices, however, farmers started taking the water from ponds not connected to the aquifer. As the SWAT model does not consider NO_3 concentration in irrigation water, the corresponding N load was calculated for 10 mm of water (each irrigation dose) based on the annual groundwater nitrate measurements. The calculated value was applied simultaneously with each irrigation dose as a mineral N fertilizer. This annual groundwater concentration dataset was taken from the Groundwater Control Network website of the Water Agency of the Basque Country (www.telur.es/redbas).

Irrigated crops (sugar beet and potato) receive, respectively, about 100 and 120 mm of water a year. So, depending on the annual NO_3 concentration of the groundwater, N added with irrigation water is equivalent to fertilization doses ranging between 4.5 and 37.8 kg ha^{-1} year $^{-1}$ for sugar beet areas, and between 5.4 and 45.4 kg ha^{-1} year $^{-1}$ for potato fields. Due to the large extent of irrigated crops areas, especially in the first years of the simulation, a detailed irrigation schedule had to be established in order to avoid all the HRUs receiving irrigation at the same time.

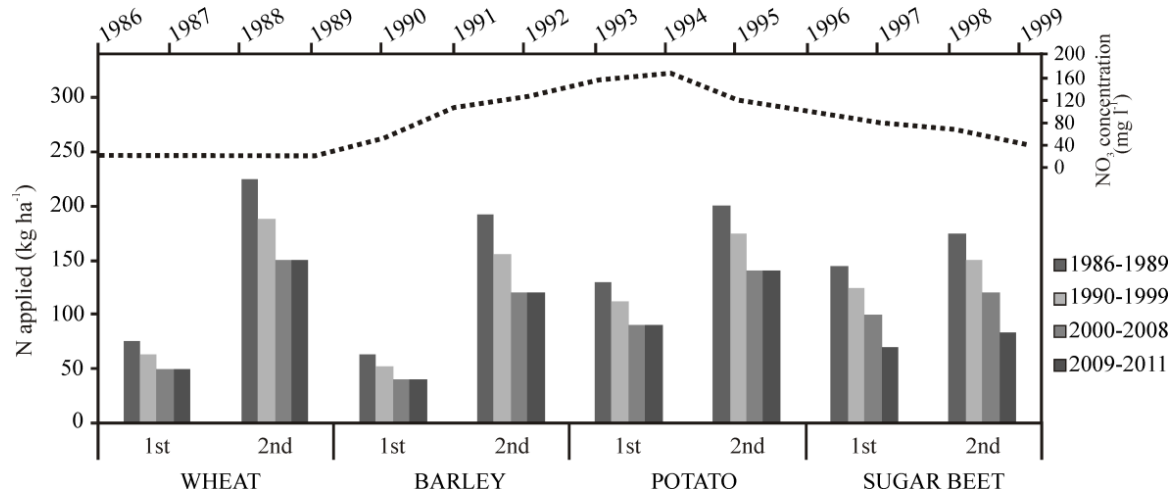


Figure 3-2. Evolution of top (first) and dressing (second) fertilization (kg N ha^{-1}) during the simulated period. Nitrate concentration considered in irrigation water is shown on the secondary y-axis.

3.1.2.4. MODEL EVALUATION

The performance of the SWAT model was evaluated using the following statistical indices: percent bias (PBIAS), coefficient of determination (R^2), root mean square error (RMSE), RMSE-observations standard deviation ratio (RSR) and Nash-Sutcliffe efficiency (NSE) (Moriassi et al., 2007). The PBIAS measures the average tendency of simulated data to be larger or smaller than the observed counterparts. Positive and negative values indicate model underestimation and overestimation bias respectively. The performance is better for small magnitudes of PBIAS. The R^2 represents the proportion of total variance in the observed data. Values range from 0 to 1, where 1 is the best performance. The NSE coefficient indicates how well the plot of observed versus simulated values fits the 1:1 line. Its value ranges from $-\infty$ to 1, with $\text{NSE}=1$ being the optimal value. Lastly, RSR represents the ratio of RMSE and standard deviation of observed data. Its value ranges from 0 to a large positive value, with 0 being the optimal value.

To evaluate the daily and monthly results of this study, the following criteria were used: NSE satisfactory at >0.5 ; PBIAS satisfactory at below $\pm 25\%$ for streamflow and below $\pm 70\%$ for nitrogen; RSR satisfactory at <0.7 (Moriassi et al., 2007); and R^2 satisfactory at >0.5 (Green et al., 2006).

3.1.2.5. DATA USED FOR CALIBRATION AND VALIDATION

The whole simulation was performed with a daily time step; the first 4 years (1986-1989) were excluded from the results since they were used as a warm-up period. The calibration “by stages” detailed by Nair et al. (2011), leaving nutrient load calibration as last step, has been used

in many publications (Behera and Panda 2006; Ferrant et al., 2013) and seemed the most appropriate for our purposes. First, a sensitivity analysis was carried out in order to identify calibration parameters. Then, by manual calibration the parameters presented in Table 3-4 were adjusted. Streamflow was the first variable to be calibrated, although it was necessary to recalibrate it once crop-related parameters had been well adjusted. After calibrating streamflow and crop yield, N cycle-related parameters were adjusted. Initial values for following parameters were established using data provided by Neiker-Tecnalia: Initial nitrate concentration in the shallow aquifer, SHALLST_N = 15 mg L⁻¹; initial nitrate concentration in the soil layer, SOL_NO3 = 5 mg kg⁻¹; and Initial organic nitrogen concentration in the soil layer, SOL_ORGN = 700 mg kg⁻¹. For calibration and validation of the model the following field data was used:

Streamflow

River discharge was calibrated at the outlet of the watershed using field measured water levels, which were converted to discharge using a rating curve. This work was performed within the framework of the Aguaflash project (Interreg-SUDOE) by Cerro (2013). All available discharge data were used, from which the period 21 October 2009-31 December 2010 was used for calibration and 1 January 2011-31 December 2011 for validation. The most sensitive parameters to the water balance and the assigned values are shown in Table 3-4.

Parameter	Input file	Description	Range	Calibrated value
EPCO	.bsn	Plant uptake compensation factor	0.01-1	1
ESCO	.bsn	Soil evaporation compensation factor	0.01-1	0.9
SURLAG	.bsn	Surface runoff lag coefficient	1-24	5
CDN	.bsn	Denitrification exponential rate coefficient	0-3	0.01
CMN	.bsn	Rate coefficient for mineralization of the humus active organic nutrients	0.0001-0.003	0.002
RSDCO	.bsn	Rate coefficient for mineralization of the residue fresh organic nutrients	0-0.1	0.01
NPERCO	.bsn	Nitrogen percolation coefficient	0.01-1	0.8
SDNCO	.bsn	Denitrification threshold water content	0-1	0.95
ALPHA_BF	.gw	Baseflow alpha factor	0-1	0.35

GW_DELAY	.gw	Groundwater delay	0-500	0.5
GW_REVAP	.gw	Groundwater revap coefficient	0.02-0.2	0.02
REVAPMN	.gw	Threshold depth of water in the shallow aquifer for revap to occur	0-8000	2000
GWQMN	.gw	Threshold depth of water in the shallow aquifer required for return flow to occur	0-5000	800
HLIFE_NGW	.gw	Half-life of the nitrate in shallow aquifer	0-5000	2500
CN2	.mgt	Curve number	0-100	±10% of initial values

Table 3-4. Main variables used for sensitivity and calibration in SWAT.

Crop Yield

Many studies have demonstrated the difficulties of capturing annual variations in crop yield well with the SWAT model (and the EPIC crop growth sub-model on which SWAT is based) (Huang et al., 2006; Srinivasan et al., 2010). For this reason, prediction of yield for individual years is not recommended (Moulin et al., 1993), and researchers use long-term average data to compare simulated and measured crop response variability. In this study, the crop yield evaluation focused on the comparison of simulated data with mean values from recent years (2002-2011). The studied crops were wheat, barley, oats, potato and sugar beet. Given the agricultural similarities between barley and oats, we decided to simulate them as a single group, which was renamed as barley (so, from now on, barley data will be a mean value for these two crops). Real crop yield data from the last 10 years were obtained from the Agricultural Department of the Basque Government. The SWAT model estimates dry crop yield and, hence, in order to perform comparisons with observed data (given in wet weight), simulated values (tonnes per hectare) were converted from dry to wet weights. For that conversion, the following moisture contents were considered: wheat and barley, 10%; potato, 75%; and sugar beet, 80% (Kenneth and Hellevang 1995, Scanlon 2005, NDSU 2006). The harvest index of sugar beet was adjusted in the crop database, owing to a rather low estimated yield. We assumed a value of 1.1 instead of the default value of 0.95. It should be kept in mind that simulated yield corresponds to the potential value and so higher yields than observed values were expected in the simulation. The evapotranspiration process was calculated by the Hargreaves PET method.

Nitrogen

In the context of different research studies, N-NO₃ concentration has been measured in the Alegria River in three different periods: 1990-1994, 2001-2005 and 2009-2011. Arrate (1994) made an exhaustive hydrogeological study of the quaternary aquifer of Vitoria-Gasteiz. He gathered the water quality data from wells and the river for spatial and temporal analyses.

Martinez (2008) focused her research on the hydrochemical temporal evolution of surface water and groundwater. Cerro (2013) studied the impact of floods on water quality, for which she monitored physicochemical parameters in the Alegria River over a period of two years.

Commonly, in the field, what is measured is nitrate concentration (mg L^{-1}); hence, in order to process SWAT-simulated nitrogen export it was essential to convert the field-measured concentrations into continuous series of N- NO_3 load (kg d^{-1}). To do so, a continuous streamflow dataset is required. However, given that in the first two periods mentioned above there were no field-measured streamflow data, it was decided to use the simulated streamflow values in all the cases, once values during both calibration and validation had shown a good fit. Therefore, simulated streamflow and scattered field-measured N- NO_3 concentrations were used to obtain continuous load data series. This was performed with LOADEST, a FORTRAN program commonly used to estimate constituent load in streams and rivers (Runkel et al., 2004). There are several uncertainties in this process: first, the uncertainty inherent in the discharge values used, these being simulated; and, second, the representation of daily N- NO_3 load based on one or two measurements per month for some cases, especially during 1990-1994 (Arrate 1994) and 2001-2005 (Martinez 2008). The N- NO_3 load was calibrated for the period 28 October 2009-27 October 2010 and validated for three different periods: Val-1: 27 November 1990-29 June 1994; Val-2: 2 Jan 2001-22 December 2005; and Val-3: 28 October 2010-17 June 2011.

Nitrogen mass balance was calculated by Equation 3-1 and results were expressed in terms of: (i) unit of mass per time (t N year^{-1}), calculated as season mean values for the periods 1990-1999 and 2000-2011; (ii) unit of mass per time and cultivated area ($\text{kg ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$), which represents annual mean values for each study period and only considering agricultural land cover (necessary data for validation of N fluxes); and (iii) unit of mass per time and total area ($\text{kg ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$), which represents annual mean values for each period (necessary data for visualization of N fluxes at the sub-basin scale).

$$\Delta N = (N_{fert} + N_{atm} + N_{min}) - (N_{denit} + N_{up} + N_{losses}) \quad (3-1)$$

Where:

N_{fert} is N in fertilizers and in irrigation water,

N_{atm} is atmospheric N deposition,

N_{min} is N mineralized,

N_{denit} is N denitrification,

N_{up} is crop uptake

N_{losses} is N exported by streams.

The N fluxes on arable land (N wash-off, N uptake by plants, N denitrification and N mineralization) were indirectly validated by the comparison of simulated data with data obtained by Sánchez-Pérez et al. (2003) and Jégo et al. (2008) in studies carried out in the same study area. In addition, the literature was consulted to contrast the results with reasonable ranges in agricultural lands (Krysanova et al., 2002; Burkart et al., 2005; Castaldelli et al., 2013; Ferrant et al., 2013; Boithias et al., 2014). To simulate atmospheric deposition a rainfall nitrogen concentration value was estimated (1 mg L^{-1}) so that annual deposition was similar to the data obtained by Sánchez-Pérez et al. (2003) in the same area. In order to fit N fluxes and transport within the watershed, the most sensitive parameters were adjusted (Table 3-4).

3.1.3. Results and Discussion

3.1.3.1 HYDROLOGY

For the period 1990-2011, the model interpolated 660 mm mean annual precipitation, of which 68% was lost by evapotranspiration. The estimated values seemed to be within acceptable ranges according to available data for the study area (Cerro 2013).

Precipitation data of the periods 1990-1999 and 2000-2011 (Figure 3-3) suggest drier summers and wetter winters during the second period. In the upper part of Figure 3-3 the seasonal mean precipitation values for each meteorological station considered in the study are shown. In general, it can be noted that Kapildui is the station in which higher precipitation is registered and Arkaute is the one with the lower precipitation. The lengths of the box plots in Figure 3-3 indicate greater variability in the rainfall during the second period in most months.

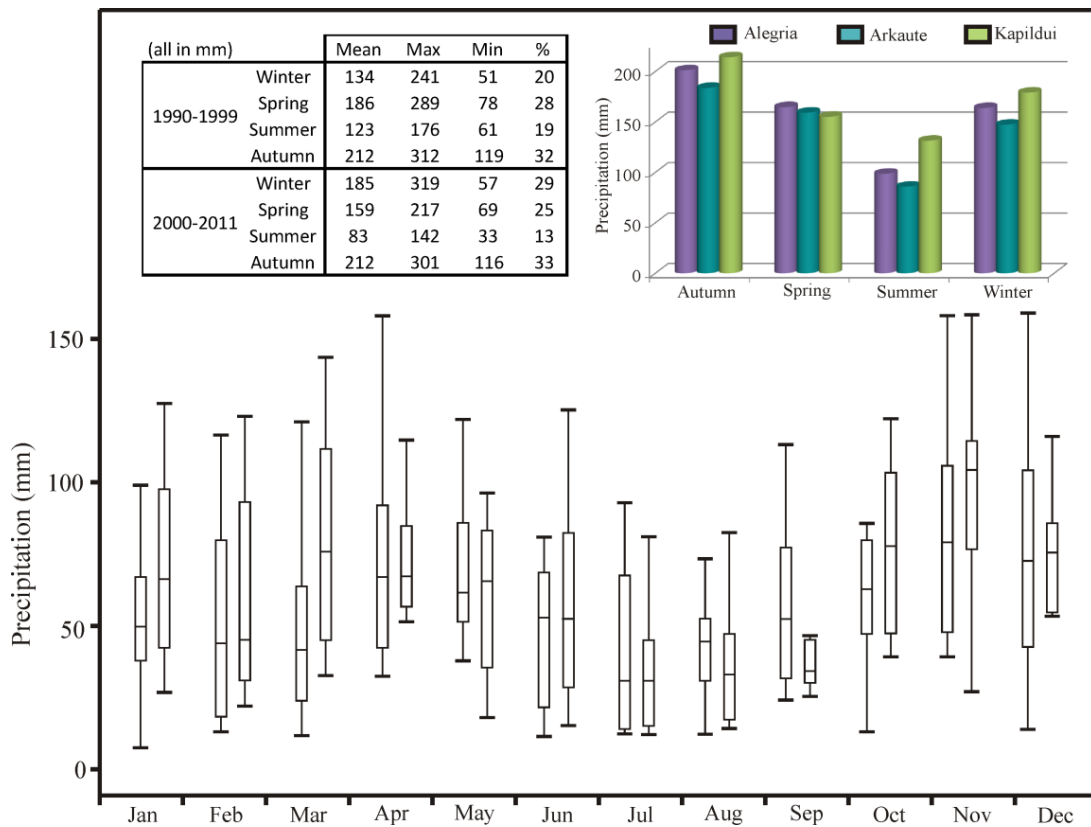


Figure 3-3. Paired box plots reporting average monthly rain data from three meteorological stations and corresponding to the periods 1990-1999 and 2000-2011 periods. Median, 25th and 75th percentiles, and minimum and maximum values are shown. The table provides statistical information (mean, maximum, minimum and percentage) about the seasonal precipitation and the graph represents seasonal precipitation average in each of the meteorological stations considered in the study.

Mean daily discharge for the calibration period was 0.39 m³ s⁻¹ in the observed data and 0.43 m³ s⁻¹ in the simulated data. For the validation period, the observed and simulated mean discharges were 0.22 and 0.21 m³ s⁻¹, respectively. Daily discharges were satisfactorily simulated in the calibration period and showed good agreement during the validation period (Figure 3-4; Table 3-5). Although baseflow was simulated quite well, most of the streamflow peaks were

underestimated. It is important to note that the highest flow peak (January 2010) was related to snowmelt. Multiple iterations were completed, changing parameters linked to snow, in order to obtain a better fit of the hydrograph; however, for this event this process was not very successful. Another point to be highlighted is the uncertainty associated with the observed streamflow data. As noted by Cerro et al. (2014a), there are some uncertainties in the rating curve for very high flows. In addition, we should remember that there is uncertainty related to the interpolation of rainfall data, an aspect that could have influenced the simulation of high flow values.

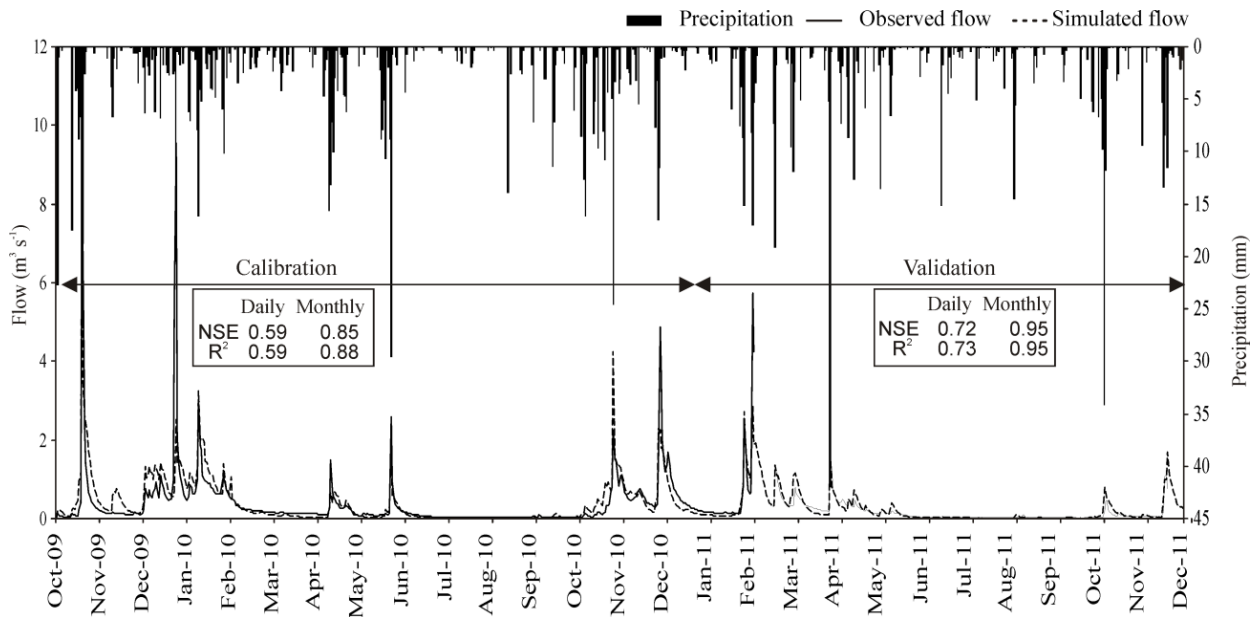


Figure 3-4. Observed and simulated daily discharge at the Alegria watershed outlet ($m^3 day^{-1}$). Daily and monthly statistical values are provided for calibration and validation periods.

Based on the statistical indices, flow simulations are, in the worst case, satisfactory. In general, the statistical indices improve from daily to monthly analysis as long-term means have relatively smaller errors than short-term values (Winter 1981) (Table 3-5). Specifically, for the daily analysis, the NSE and R^2 values for the model were 0.59 and 0.59, respectively, for the calibration period and 0.72 and 0.73 for validation period, while for the monthly analysis, NSE and R^2 were 0.85 and 0.88, respectively, for the calibration period and 0.95 and 0.95 for the validation period. In all cases, PBIAS was at worst case 11%, and also RSR indicated satisfactory results.

Simulated annual water yield calculated from the recorded precipitation grouped into periods 1990-1999 and 2000-2011 has been quantified as 12 and 13 hm^3 . Field measurements indicate that, during the streamflow calibration period (15 months) 15 hm^3 was exported from the watershed through the main channel, while during the validation period (12 months) it was 7 hm^3 . Simulation results show similar values, 16 and 8 hm^3 being the exported water yield for calibration and validation periods, respectively.

The streamflow components indicate that 85% is contributed by groundwater, 3% by lateral flow and 12% by surface runoff. This distribution of components corresponds well to the special characteristics of lowland areas, as reported by Lam et al. (2011).

	STREAMFLOW					NITRATE						
	Daily		Monthly			Daily			Monthly			
	Cal.	Val.	Cal.	Val.	Cal.	Val-1	Val-2	Val-3	Cal.	Val-1	Val-2	Val-3
NSE	0.59	0.72	0.85	0.95	0.77	0.74	0.73	0.75	0.92	0.94	0.94	0.67
R ²	0.59	0.73	0.88	0.95	0.86	0.76	0.74	0.83	0.99	0.96	0.95	0.91
PBIAS (%)	-10	6	-11	4	-7	7	-12	29	-7	7	12	28
RSR	0.64	0.53	0.39	0.24	0.48	0.51	0.52	0.50	0.29	0.25	0.25	0.57

Table 3-5. Statistical summary for streamflow and nitrates.

3.1.3.2. CROP YIELD

Although the annual variability of crop yield was not well reproduced, simulated crop yields were well adjusted to the observed values in the longer term (10 years). Observed and simulated mean values for the period 2002-2011 were respectively: 5.4 and 5.2 t ha⁻¹ year⁻¹ for wheat; 4.8 and 7.0 t ha⁻¹ year⁻¹ for barley; 34.7 and 40.6 t ha⁻¹ year⁻¹ for potato; and 80.9 and 84.7 t ha⁻¹ year⁻¹ for sugar beet. In principle, higher values were expected for the simulated yield, as they represent the potential crop yield not influenced by any disease. Further, differences between the observed and simulated yields on the annual scale could be explained by discrepancies between the observed and simulated crop stresses: with the simplification of adopting fixed planting and harvesting dates (throughout the simulation period), we have not taken into account modifications in dates that could have been made by farmers due to the meteorological conditions in a given year. The differences in crop cycles from year to year are likely to imply different levels of stress to that simulated, which in turn will have an impact on simulated crop yield.

Figure 3-5 illustrates the simulated annual dry yield for each crop, and also the mean annual precipitation (mm) and solar radiation (M J m² day⁻¹). Although a slight positive relationship can be perceived between precipitation and solar radiation with crop yield, it is difficult to obtain good regression coefficients on the annual scale.

3.1.3.3. NUTRIENTS

Soil Nitrogen Mass Balance

In the nitrogen mass balance, a positive ΔN value means that nitrogen is being retained in the system and negative ΔN that nitrogen inputs are lower than outputs during a given period, considering the outputs as the N losses by all the possible pathways. The nitrogen mass balance results were processed to obtain representative differences between the periods 1990-1999 and 2000-2011 (Tables 3-6; 3-7; Figure 3-6).

In the Figure 3-6 the input, output and surplus differences between the two distinguished periods can be distinguished; the lower N input and output during the period 2000-2011 led to a lower N surplus over the study area. These maps not only show the differences between the periods, but also allow one to identify the zones that contribute most to the N pollution of the watershed.

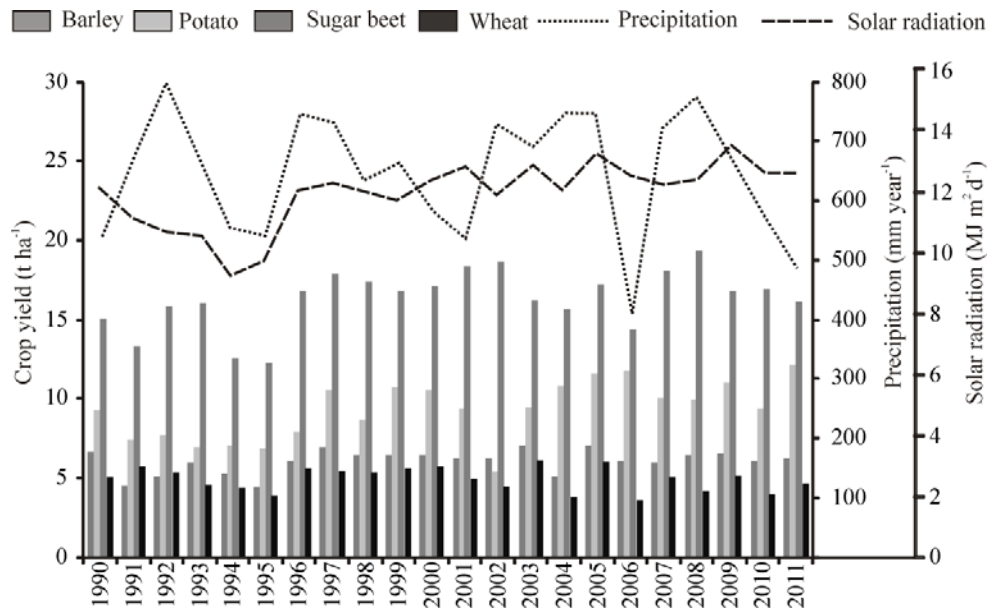


Figure 3-5. Simulated annual crop yield ($t\ ha^{-1}\ year^{-1}$), mean precipitation ($mm\ year^{-1}$) and mean solar radiation (MJm^2day^{-1}).

The simulation results of total N input to the system show an input of $1668 \pm 124\ t\ year^{-1}$ in 1990-1999 and $1364 \pm 76\ t\ year^{-1}$ in 2000-2011 (Table 3-7). In Table 3-6, inputs and outputs are expressed in percentages. The main N input is from fertilization (54-61% of the total) followed by that from mineralization process both of humus and active pools (37-44%), and lastly, from atmospheric deposition (2%).

Total N output was estimated to be 1231 ± 119 and 1091 ± 103 for the periods 1990-1999 and 2000-2011, respectively (Table 3-7). The main N output is due to plant uptake (66-77%), followed by stream losses (12-13%) and denitrification (11-21%) (Table 3-6). Each of the processes shows quite large variability within a given year, mainly due to the distribution of fertilization and precipitation. In order to quantify the differences over the year, N balance inputs and outputs were averaged for each season for the periods 1990-1999 and 2000-2011 (Table 3-7). It should be noted, though, that in Table 3-7 total inputs and outputs are represented, and these are affected not only by meteorology and crop growth stage, but also by the surface area occupied by each crop during the corresponding period. Regarding the N inputs, it should be noted that the highest values are registered during spring and are related to fertilization. Mineralization is the second process that contributes notably to N inputs, the maximum value being registered in autumn, coinciding with the harvesting days. In contrast, plant uptake is the process which most contributes to the N output with maximum values during spring in both periods. However whereas in the period 1990-1999 N uptake is quite significant during the winter and summer, in the period 2000-2011, the values are quite low during the summer. This may be due, in part, to the change of crop type and, in turn, the crop cycle from one period to the other. Denitrification decreases from first to the second period, but remains quite similar over the seasons except for summer, where meteorological conditions are less favourable for this process to occur. In both the periods 1990-1999 and 2000-2011, stream losses are the highest during autumn and winter, a fact directly linked to the precipitation registered during these seasons.

	1990-1999		2000-2011	
	kg N ha ⁻¹ year ⁻¹	% of total	kg N ha ⁻¹ year ⁻¹	% of total
<i>Input</i>				
Fertilization	260 (27)	61	185 (14)	54
Atmospheric deposition	7 (1)	2	6 (1)	2
Mineralization	159 (11)	37	149 (10)	44
ΣInput	426 (34)	100	340 (21)	100
<i>Output</i>				
Plant uptake	206 (20)	66	211 (18)	77
Denitrification	64 (17)	21	30 (7)	11
Stream losses	40 (12)	13	34 (12)	12
ΣOutput	312 (31)	100	275 (27)	100
<i>ΣInput-Σoutput</i>	114 (41)		65 (19)	

Table 3-6. Soil system N budget for cultivated lands in the Alegria River watershed (annual average values and standard deviation are given). Values are expressed per hectare of cultivated land (kg N ha⁻¹ year⁻¹).

In order to validate simulated N fluxes, only the results obtained from agricultural lands were considered. In this way, an indirect validation of the N balance was performed using regional and general ranges documented in the literature. The results obtained suggest a total N surplus equivalent to area weighted mean values of 114 and 65 kg ha⁻¹ year⁻¹ for 1990-1999 and 2000-2011, respectively (Table 3-6). The relationship between outputs and inputs is estimated to be 73 % in the first period and 81% in the second. These values seem to be within acceptable ranges. In fact, in a study carried out in the same area during the years 1993-1994, this relationship was estimated to be 87% on a cultivated area and 26% on non-cultivated land (Sánchez-Pérez et al., 2003). As would be expected, the average value obtained in our study is much closer to that previously obtained for the cultivated area. This is attributable to the fact that our values were based on larger temporal and spatial scales, comprising the processes at the watershed scale, including those occurring in the intervals between cultivation periods.

The mineralization fluxes remained similar over time: 159 and 149 kg ha⁻¹ year⁻¹ for the 1990-1999 and 2000-2011 periods, respectively. These values are higher than those reported by Jégo et al. (2008) in the same study area, which range from 55 to 69 kg ha⁻¹ year⁻¹, but are within the range for general arable lands reported by Krysanova et al. (2002), ranging from 40 to 180 kg ha⁻¹ year⁻¹. In the literature, N uptake ranges are reported for several different crops; grains have the lowest uptake (100- 200 kg ha⁻¹ year⁻¹), while it is somewhat higher for root crops-potato: 142-233 kg ha⁻¹ year⁻¹ and sugar beet: 200-250 kg ha⁻¹ year⁻¹, according to Krysanova et al. (2002) and Tyler et al. (1983), respectively. In our study, annual mean values were calculated (Table 3-6): 206 and 211 kg ha⁻¹ year⁻¹ for the periods 1990-1999 and 2000-2011, respectively; these values

seem to be within reasonable ranges. In any case, it is interesting to separate N uptake fluxes for each crop. The simulated results show 177, 199, 205 and 269 kg ha⁻¹ year⁻¹ for potato, barley, wheat and sugar beet, respectively.

The higher plant uptake for 2000-2011 compared to 1990-1999, together with the fact that the fertilization rate was markedly higher during the first period, provides evidence for over-fertilization that has been occurring in recent decades in the watershed.

	1990-1999				2000-2011			
	High fertilization doses + irrigation water taken from the aquifer				Low fertilization doses + irrigation water taken out from the aquifer			
	Winter	Spring	Summer	Autumn	Winter	Spring	Summer	Autumn
Input								
Fertilization	343 (33)	580 (86)	38 (21)	0 (0)	208 (13)	474 (39)	0 (0)	0 (0)
Atmospheric deposition	7 (3)	10 (4)	7 (2)	11 (3)	10 (4)	8 (2)	4 (2)	11 (3)
Mineralization	182 (17)	115 (18)	143 (22)	233 (21)	154 (7)	92 (4)	181 (11)	221 (22)
ΣInput (Seasonal)	532 (43)	704 (94)	187 (18)	245 (22)	372 (20)	575 (42)	185 (11)	232 (23)
ΣInput (Total)	1668 (124)				1364 (76)			
Output								
Plant uptake	136 (59)	510 (59)	141 (57)	25 (7)	234 (47)	518 (60)	48 (10)	35 (14)
Denitrification	69 (20)	71 (26)	49 (12)	58 (11)	34(8)	31 (7)	23 (6)	31 (7)
Stream losses	61 (40)	37 (41)	8 (7)	65 (40)	67 (37)	18 (15)	3 (2)	49 (29)
ΣOutput (Seasonal)	266 (76)	619 (70)	198 (61)	148 (45)	335 (45)	567 (63)	74 (14)	115 (41)
ΣOutput (Total)	1231 (119)				1091 (103)			
ΣInput-Σoutput (Seasonal)	266 (114)	86 (114)	-11 (65)	96 (39)	37 (36)	118 (28)	111 (17)	118 (28)
ΣInput-Σoutput (Total)	437 (156)				273 (72)			

Table 3-7. Soil system N budget for the Alegria River watershed (annual seasonal average values and standard deviation are given). Values are expressed as mass net values (t N year⁻¹).

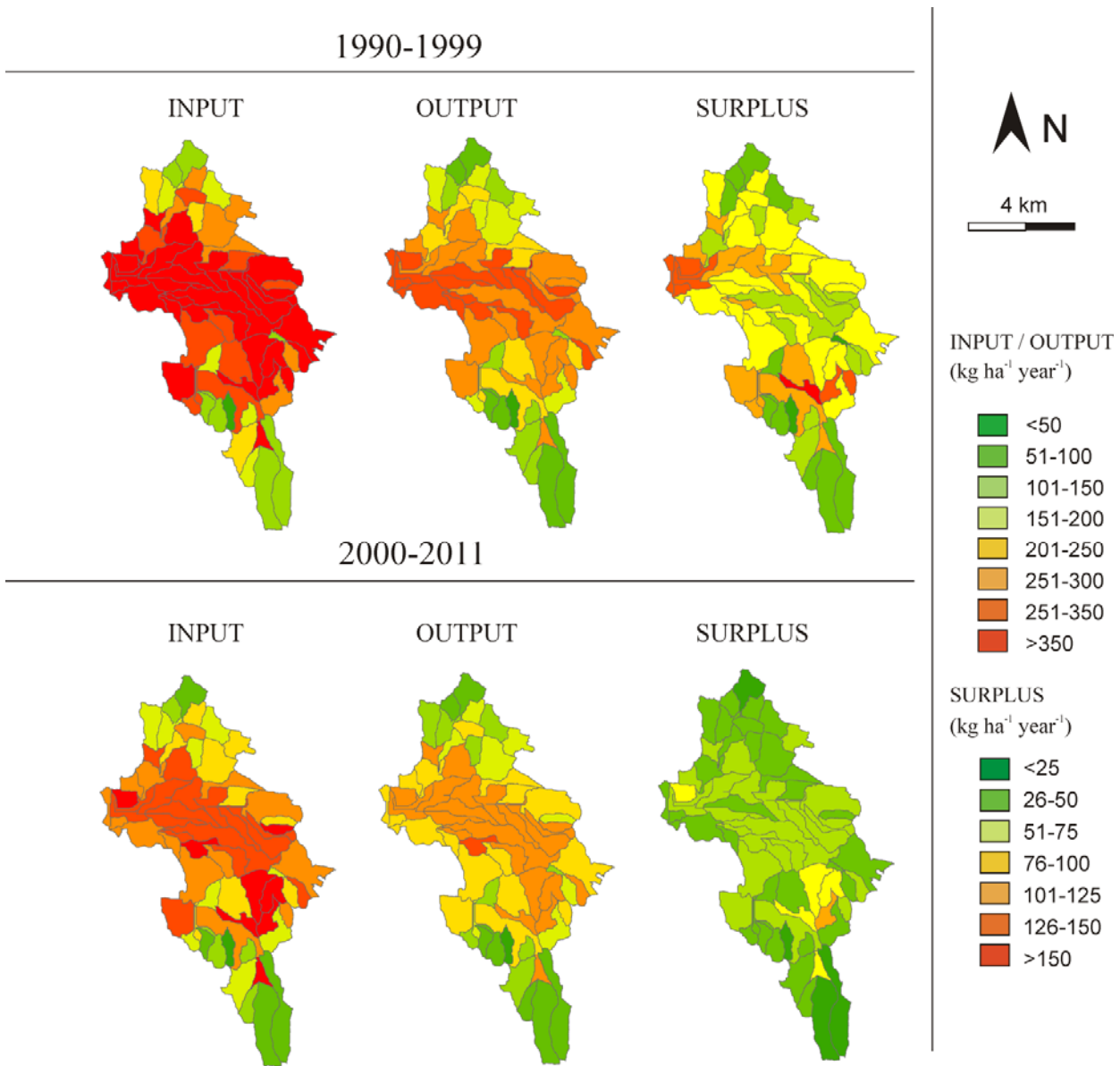


Figure 3-6. Spatial distribution of simulated nitrogen input, output and surplus (kg N ha⁻¹ year⁻¹) for the periods 1990-1999 and 2000-2011.

Regarding denitrification fluxes in arable lands, it can be noted that, whereas the value obtained for 1990-1999 (64 kg ha⁻¹ year⁻¹) is slightly higher than the ranges reported for general arable lands (20-60 kg ha⁻¹ year⁻¹ according to Krysanova et al., 2002), the value obtained for 2000-2011 (30 kg ha⁻¹ year⁻¹) is within the expected range.

Total N outputs were quantified and the relationship with regard to the precipitation regime was obtained. In fact, meteorology is thought to be an important factor in determining the system N balance. On a seasonal scale, we did not find a strong association between the precipitation regime and total N output from the system. In contrast, on the annual scale, precipitation and N outputs are well correlated (Figure 3-7). Indeed, this relationship demonstrates a difference in the effect of precipitation over the two periods: a given annual precipitation is associated with a considerably higher N output in the period 1990-1999 than in 2000-2011.

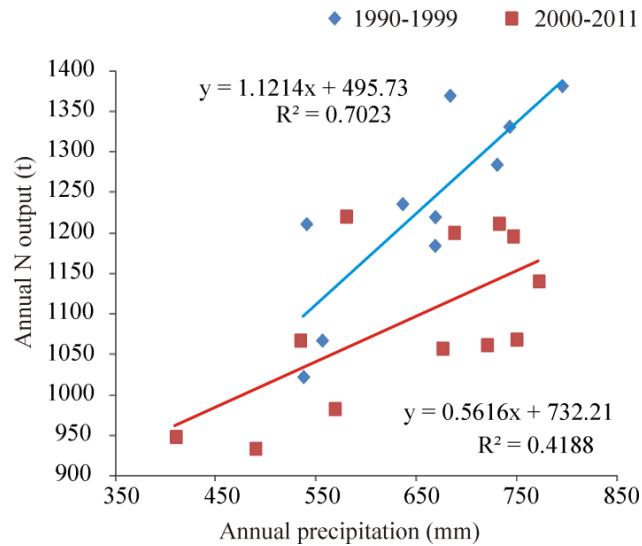


Figure 3-7. Relationship between annual precipitation and annual N output for the periods 1990-1999 and 2000-2011.

Nitrogen Losses and Nitrate Concentration in Surface Waters

Using calibrated parameter data, the SWAT model successfully predicted N-NO₃ load at the outlet of the Alegria River (Figure 3-8). With a daily time step, the model performance was very good during the calibration period (NSE: 0.77) and good during the validation periods (NSE: 0.74, 0.73 and 0.75).

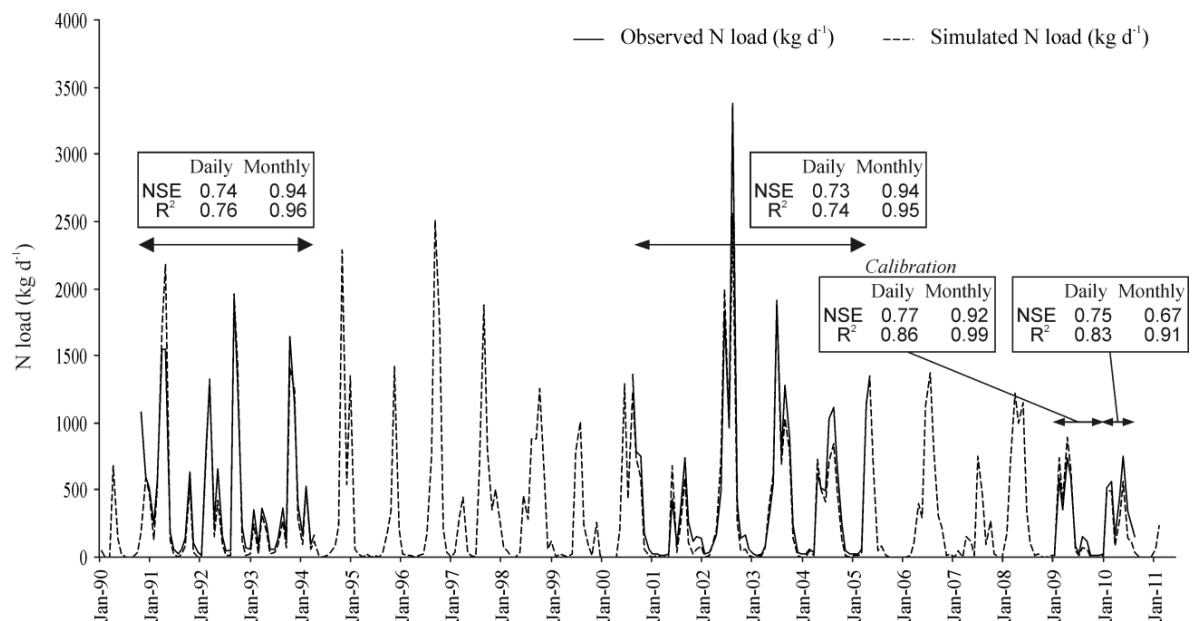


Figure 3-8. Observed and simulated monthly average nitrogen load (kg N d⁻¹) at the Alegria watershed outlet. Daily and monthly statistical values are provided for calibration and validation periods.

The main differences between the observed and simulated data can be seen in high peaks (Figure 3-8). These differences might be associated with the following uncertainties: (a) streamflow calibration, which directly affects nutrient simulation; (b) representativeness of the data, especially for the periods 1990-1994 and 2001-2005, when field measurements used for

daily estimates were scarce; and (c) input related to management practices, which have been assumed to be the same over time in the simulation.

The high nitrate peaks coincide with flood events, reflecting the fact that they are pushed through the system in rainy periods. During the drought season, nitrate tends to accumulate in the aquifer, behaving as nitrate storage, until higher water flows flush them out (Cerro et al., 2014a). Indeed, the annual exported amount of nitrate is largely controlled by hydrological conditions (simulated water yield and nitrogen export in the period 1990-2011 having a value of $R^2=0.74$).

There is a pronounced decrease in exported N-NO₃ over the years. While in 1990-1999 the mean simulated annual value was 132 t, in 2000-2011 it fell to 110 t. Although a lower precipitation regime could explain lower export during a given year, we think that for longer periods only a reduction in fertilizer use and change in irrigation water origin could explain this reduction in the exported nitrogen.

The general trend of nitrate concentration (mg L⁻¹) in Alegria River was adequately simulated (Figure 3-9). It should be noted that whereas simulated NO₃ monthly averages were calculated from daily data, the observed NO₃ averages were obtained from data with a highly-scattered sampling frequency (in many cases one or two samples per month in the periods 1990-1994 and 2000-2005). A more accurate sampling strategy between 2009 and 2011 is reflected in less variation between the observed and simulated monthly averages. Especially in the last period, it can be seen that during the low water level periods the difference between the observed and simulated nitrate concentration is higher. This pattern has already been studied by several authors (Arrate 1994 and Martinez 2008) and has been linked to the N uptake by plants in river channels.

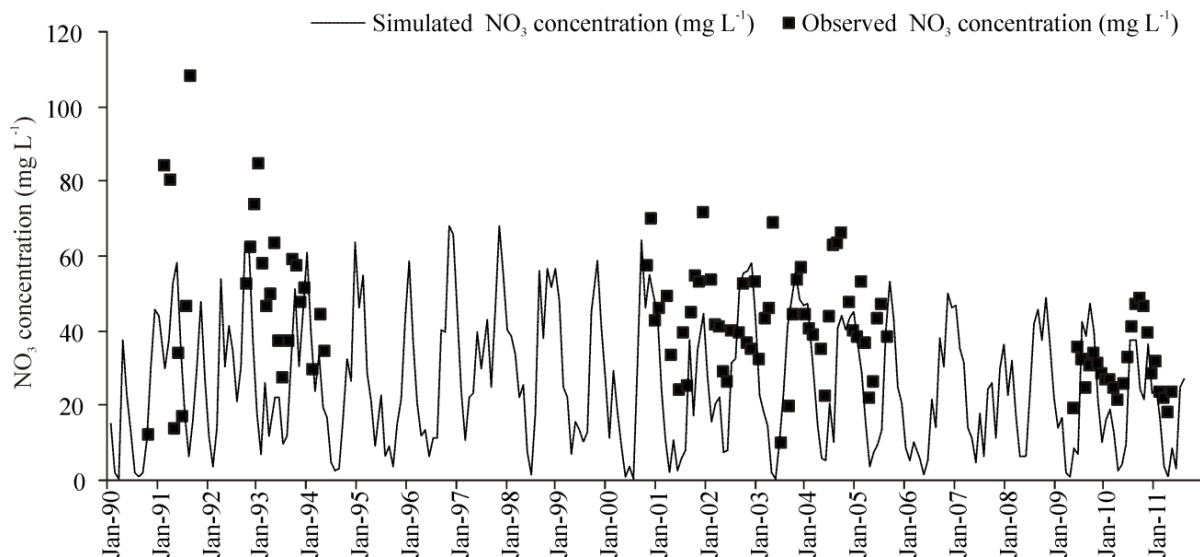


Figure 3-9. Observed and simulated monthly average nitrate concentration (mg NO₃ L⁻¹) at the Alegria watershed outlet.

Nitrate Concentration in Groundwater Contribution

The assumption of no interaction between HRUs and the lack of a full groundwater balance (SWAT only simulates nutrients in a shallow aquifer) may mean that groundwater

contributions to streamflow are not representative of the nitrate concentration in the aquifer. However, in the present study, the fact that groundwater is main streamflow component in an area where the aquifer is quite shallow, there is no regional discharge and there is diffuse pollution over the 85% of the aquifer, led us to think about the possibility of simulating groundwater nitrate concentration through the groundwater contribution to streamflow.

Following this approach, we calculated the mean NO_3 concentration in the groundwater contribution to streamflow and obtained a similar trend to that described by Sánchez-Pérez et al. (2003), which was representative of the groundwater NO_3 concentration. Figure 3-10 represents the mean annual NO_3 concentration for all the HRUs in the watershed and also the concentration obtained from cultivated HRUs. As can be observed, the mean watershed nitrate concentration increases over the first years of the simulation reaching maximum values during the 1990s decade and decreasing over the following years, a pattern that has already been reported by several authors (Arrate et al., 1997; Sánchez-Pérez et al., 2003; Martinez, 2008).

The trend was directly linked to high fertilizer doses applied during the 1990s, as well as to the recirculation of the water used for irrigation. Further, there is also considerable difference between the trend in global nitrate concentration (all HRUs of the watershed) and the trend obtained from cultivated HRUs. The latter shows an annual concentration value approx. 10-20 mg L^{-1} higher than the annual value obtained from HRUs of the entire watershed.

N Dynamics

The environmental impact of the agricultural practices is controlled by the crop type, hydrometeorological conditions, crop management practices and soil characteristics (Jégo et al., 2008). In Figure 3-11, it can be observed that both N export (t year^{-1}) through streams and nitrate concentration in the river (mg L^{-1}) are highly dependent on the precipitation regime ($R^2=0.75$). In the same figure, the different pathways for discharge flow are presented. It can be seen that groundwater flow is the dominant pathway, accounting for 85% of the total discharge, on average. It should be noted that the low value of lateral flow is related to a shallow groundwater table and the small surface contribution due to the flat topography (Lam et al., 2010).

Table 3-8 summarizes the correlation between each of the water contribution pathways and annual precipitation, N export and nitrate concentration in the river. In each case, 22 values were considered, and both Pearson correlation and bilateral significance are shown. Annual precipitation has high correlation coefficients with surface and groundwater contributions: $R^2 = 0.841$ ($p < 0.01$) and 0.847 ($p < 0.01$), the groundwater contribution being the factor most strongly correlated with N export: $R^2 = 0.841$ ($p < 0.01$). Figure 3-10 shows annual groundwater NO_3 concentration. It can be appreciated that it does not follow the annual variability seen in the river concentration, showing in contrast a stronger response to fertilizer input than to meteorological conditions (Table 3-8).

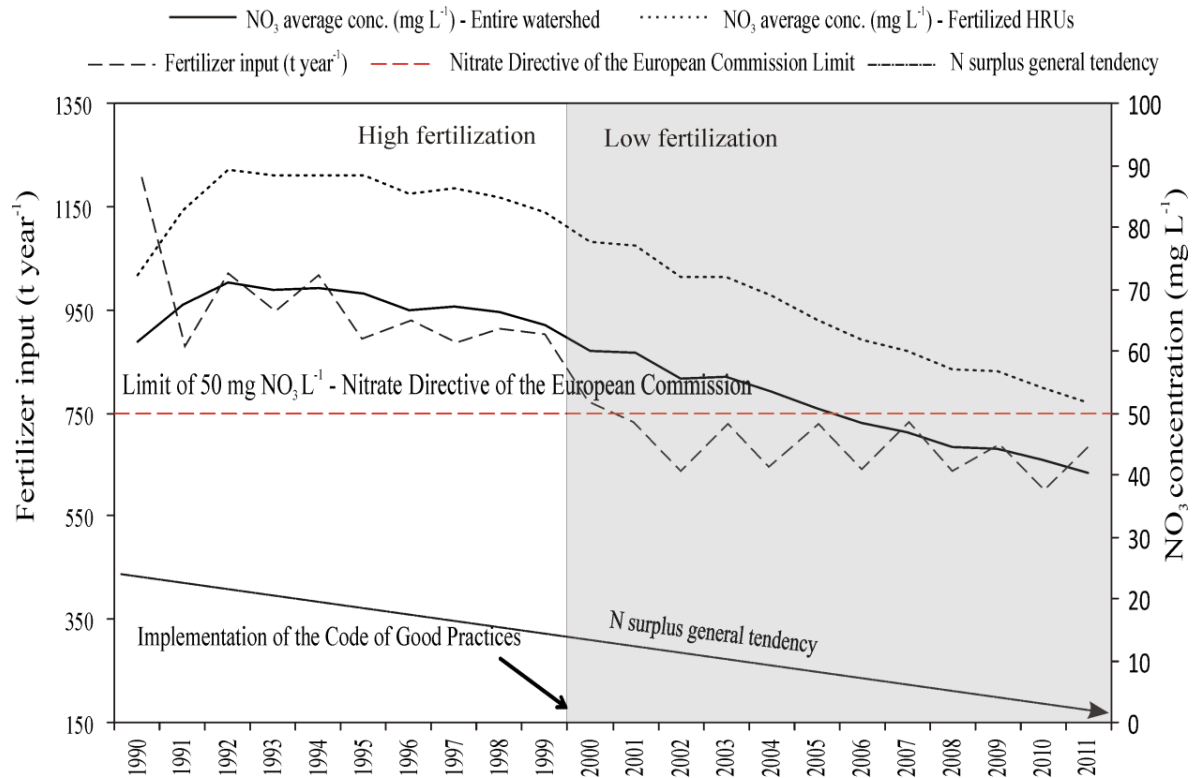


Figure 3-10. Simulated annual evolution of groundwater NO_3 concentration ($\text{mg NO}_3 \text{ L}^{-1}$) (considering all the HRUs of the entire watershed and only the agricultural HRUs) and annual fertilizer input (t year^{-1}). High and low fertilization periods (1990-1999 and 2000-2011, respectively) are highlighted. The dashed (red) line indicates the nitrate limit set by the European Commission and the arrow the simulated trend of annual N surplus.

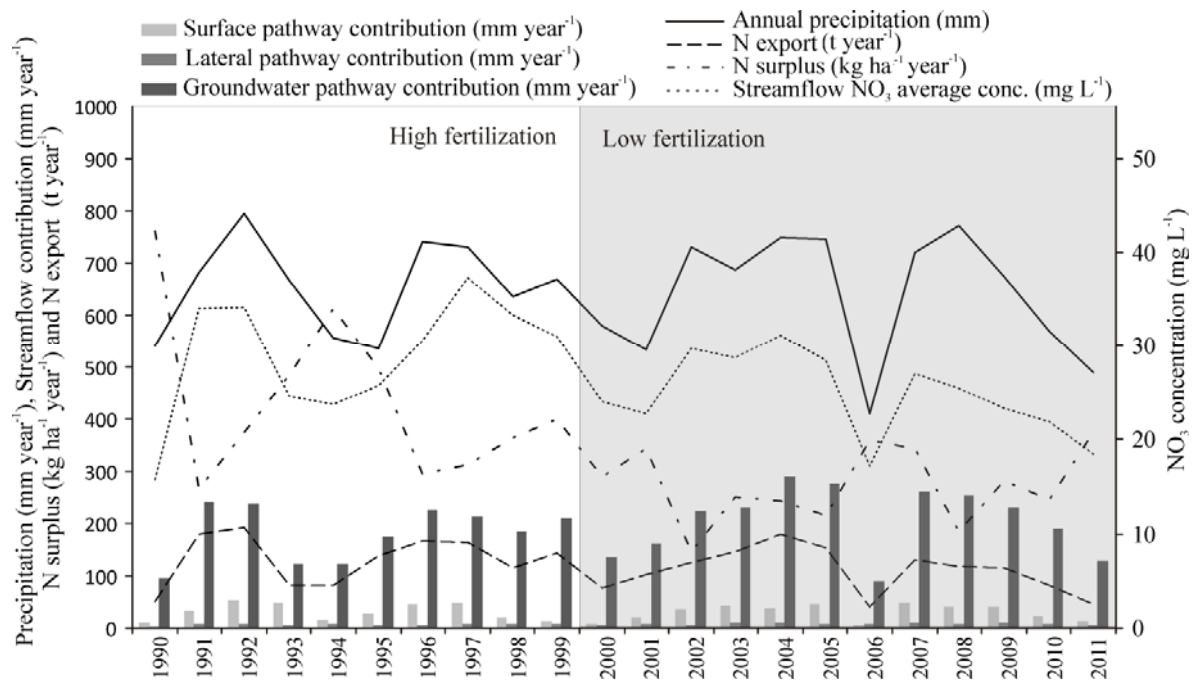


Figure 3-11. Simulated annual stream flow contribution by surface, lateral and groundwater pathways. High and low fertilization periods (1990-1999 and 2000-2011, respectively) are highlighted. Annual precipitation (mm year^{-1}), N surplus ($\text{kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$), N export (t N year^{-1}) and stream flow NO_3 concentration ($\text{mg NO}_3 \text{ L}^{-1}$) are also shown.

Figure 3-10 illustrates the lag time required to decrease nitrate concentration in the aquifer after environmental measures have been taken. We estimate that a 25% decrease in fertilizer use led to a decrease of around 30% in both aquifer concentration and nitrogen export through river discharge. It took approximately a decade from the date the implementation of the Code of Good Practices became compulsory, in 2000, until the nitrate concentration in the aquifer reached the target set in the code. The relationship between nitrogen export and precipitation regime can be explained by the nutrient flushing process. Usually, nutrients are flushed out of the landscape during hydrologically active periods, especially during flood events, while in drier ones they are retained in the aquifer (Oeurng et al., 2010; Cerro et al., 2014a). This would explain the higher nitrate concentration in the river when precipitation is high.

The flushing process may have different origins, such as, for instance, the common surface runoff occurring after saturation of the nitrogen-enriched top layers (Bath et al., 2007; Oeurng et al., 2010; Zhang et al., 2010). However, in the Alegria River watershed, this explanation does not apply, as the groundwater is the main source for the nitrates in the streams. In this watershed, the larger proportions of both water and nutrients are first stored in the aquifer and are then released into the streams. This behaviour was analysed by Cerro et al. (2014b), who carried out an exhaustive study of the nitrate transport during floods in the watershed. Their simulation results estimated that 97% of the total N export came through the aquifer to the main stream.

Though the regression coefficient was not high ($R^2=0.17$; Table 3-8), N surplus follows an opposite tendency to nitrogen export or nitrate concentration in streams (Figure 3-11). This can be explained by the strong correlation of N surplus with groundwater contribution and annual fertilizer input which, in turn, affect the nitrogen export and nitrate concentration in streams, among other factors.

To sum up, whereas the groundwater concentration shows a direct response to fertilizer input ($R^2 = 0.78$; $p<0.01$), the streamflow concentration is influenced mainly by exported N (a relationship that shows $R^2= 0.883$; $p<0.01$). Exported nitrogen is, in turn, highly correlated to the annual precipitation ($R^2= 0.807$; $p<0.01$).

	Prec.	SW	LW	GW	Fert.	ΔN	N export	GW conc.	River conc.
Prec.	1								
SW	.841**	1							
LW	.308	.424*	1						
GW	.847**	.723**	.563**	1					
Fert.	.003	-.040	-.499*	-.334	1				
ΔN	-.485*	-.408	-.472*	-.675**	.782**	1			
N export.	.807**	.720**	.379	.841**	.069	-.423*	1		
GW conc.	.142	.106	-.297	-.142	.780**	.433*	.369	1	
River conc.	.760**	.610**	.298	.681**	.128	-.418	.883**	.492*	1

Table 3-8. Correlation matrix of simulated variables obtained by SWAT model. ** Correlation significant at $p = 0.01$ level, * significant at $p = 0.05$ level. Prec: precipitation, SW: surface contribution, LW: lateral contribution, GW: groundwater contribution, Fert: fertilization, ΔN : N surplus, GW conc: groundwater concentration, River conc.: river concentration.

3.1.4. Conclusions

It this study, the SWAT model was used to simulate (for the period 1990-2011) discharge and N-NO₃ load in the Alegria River outlet, and crop yield and nitrogen fluxes in arable lands. Streamflow simulation showed satisfactory and good agreement with the observed data for the calibration and validation periods (NSE and R² at the daily time step of, respectively, 0.59 and 0.59 for the calibration period and 0.72 and 0.83 for the validation period). Although in the long term (10 years) crop yield was well simulated on average, the model did not give a good fit of the annual variation in crop yield.

In addition, the N fluxes were indirectly validated by comparing the simulated values with general ranges for arable land available in the literature. The results obtained in this study showed that, in arable land, N inputs in the watershed exceeded outputs by 114 and 65 kg ha⁻¹ year⁻¹ in the periods 1990-1999 and 2000-2011, respectively. These results could be linked to hydrological conditions, as well as to the agricultural management in each period. The higher plant N uptake in 2000-2011 compared to 1990-1999 where the fertilization rate was known to be higher during the first period, underlines the over-fertilization that has occurred in the watershed in recent decades. The nitrate load in the river outlet showed very good performance, with NSE and R² at daily time step of, respectively, 0.77 and 0.86 in the calibration period, and in the ranges 0.73-0.75 and 0.76-0.83, respectively, in the validation periods.

Hydrometeorological conditions, crop type and management, and soil characteristics are the factors that most influence the environmental impact of agricultural practices. Our results have shown the slow response of the aquifer nitrate concentration in the aquifer to the decrease in fertilizer doses. Specifically, it seems that it took a decade to reach the target of the Code of Good Practices adopted in 2000.

We have deduced that in the long-term, N surplus generally follows the trend in fertilization input, which directly affects the groundwater nitrate concentration. However, streamflow nitrate concentration is governed not only by groundwater nitrate concentration but also by surface water contribution. Due to the aquifer characteristics, it has been possible to reproduce historical trends in aquifer nitrate concentration with the SWAT hydrological model, an achievement that has not been reported before for any other watershed. We also note that SWAT can be used in similar hydrogeological and agricultural settings to obtain annual groundwater concentration tendency. Moreover, it is remarkable that the nitrate groundwater concentration in the aquifer is within the target of the European Nitrate Directive with the actual agricultural management.

3.1.5. Corrección de errores numéricos

Tras encontrar el error numérico descrito en el apartado 2.4.2. *Calibración de los modelos SWAT*, se procedió a cambiar el ejecutable SWAT-2009 por el ejecutable SWAT-2012, lo que acarrió una serie de cambios sobre las variables simuladas. No obstante, a pesar de que los índices estadísticos muestren un ligero descenso del rendimiento de la simulación en cuanto a exportación de carga de N simulada, los índices estadísticos de la simulación siguen siendo aceptables (Tabla 3-9) por lo que no se consideró modificar el valor de los parámetros calibrados anteriormente.

La variable que cambia en mayor medida tras el cambio del ejecutable es la exportación de carga de N, la cual aumentó de 120 a 128 t año⁻¹ (7%) considerando el periodo 1990-2011. En cuanto a los índices estadísticos se refiere, estos disminuyeron ligeramente con el uso del nuevo ejecutable, si bien es cierto que comparando los valores anteriores (a nivel diario, NSE: 0.77; R²: 0.86) con los mostrados en la Tabla 3-9 (obtenidos del modelo construido con SWAT-2012), donde NSE y R² están cuantificados en 0.41 y 0.43, respectivamente, este descenso parece muy notable. Por ello, es importante destacar que este descenso no sólo es debido al cambio del ejecutable empleado, sino que también, y, probablemente, de mayor impacto sobre los valores

estadísticos, al hecho de haber empleado diferentes series para la evaluación de los resultados simulados. Dado que una vez cambiado el ejecutable los resultados querían ser comparados con los resultados del modelo MOHID (apartado 4. *Simulación de procesos hidrológicos y de calidad mediante diferentes aproximaciones numéricas*), la evaluación de su rendimiento en términos de exportación de carga, se realizó mediante la comparación con la serie diaria de carga obtenida a través del programa LOADEST (apartado 2.2.3. *Cálculos de carga mediante Load Estimator*) pero en esta ocasión la obtención de la serie se realizó en base a datos de caudal y concentración observados. De ahí, la gran diferencia de los valores estadísticos (Tabla 3-9) frente a los que habían sido obtenidos anteriormente (apartado 3.1.3.3. *Nutrients*; Figura 3-8). Otro aspecto a considerar es el cambio en cuanto a los periodos considerados para la calibración y validación de la exportación de carga. Si bien es cierto que hasta este momento se estaba empleando el periodo 28-Oct-2009/ 27-Oct-2010 para la calibración y el periodo 28-Oct-2010/ 17-Jun-2011 para la validación, a partir de aquí y para que estos dos periodos tuviesen una duración similar, el periodo de calibración se redujo a 28-Oct-2009/ 31-Ago-2010, dejando el resto para la validación del modelo.

A pesar de que estos índices estadísticos muestran un rendimiento menor, de acuerdo con Van Liew y Garbrecht (2003) y Moriasi et al., (2007), la exportación de carga sigue siendo satisfactoria tanto durante el periodo de calibración como en el de validación. Con el nuevo ejecutable, la exportación de agua disminuyó ligeramente, descendiendo de 24 a 20 hm³ durante el periodo 21-Oct-2009/ 31-Dic-2011. El rendimiento de la simulación del caudal durante el periodo de calibración descendió levemente de NSE: 0.59; R²: 0.59 a NSE: 0.54; R²: 0.58 (Tabla 3-9).

	Caudal (m ³ s ⁻¹)				Carga de N (kg)			
	Diario		Mensual		Diario		Mensual	
	Cal.	Val.	Cal.	Val.	Cal.	Val.	Cal.	Val.
NSE	0.54	0.66	0.84	0.87	0.41	0.50	0.80	0.52
R²	0.58	0.69	0.86	0.91	0.43	0.64	0.88	0.88
PBIAS (%)	15	19	15	19	-12	37	-12	37
RSR	0.68	0.58	0.41	0.36	0.77	0.71	0.44	0.69

Tabla 3-9. Valores estadísticos de la simulación del caudal y carga de N del segundo modelo SWAT (Cal. Corresponde al proceso de calibración; Val. Corresponde al proceso de validación).

En cuanto a la producción anual de los cultivos se refiere, ésta se cuantificó en 5.9, 7.2, 11.9 y 18.2 t ha⁻¹, en peso seco, para el trigo, cebada, patata y remolacha, respectivamente; valores muy similares a los obtenidos mediante el modelo anterior. Con lo que se comprobó que, como era de esperar, el cambio en el ejecutable no había impactado prácticamente sobre la simulación de esta variable.

Por último, en la Tabla 3-10 se muestran los flujos del ciclo del nitrógeno (kg ha⁻¹ año⁻¹) simulados para el periodo 1-Ene-2009/31-Dic-2011, tanto los calculados en base a la extensión agrícola (37 km²) como los calculados para toda la extensión de la cuenca (53 km²). A pesar de que con el cambio de ejecutable estos valores no hayan cambiado significativamente con respecto a los anteriores, es necesario representar los mismos pues tal y como se describe en el apartado 4. *Simulación de procesos hidrológicos y de calidad mediante diferentes aproximaciones numéricas*) ciertos valores del modelo MOHID se basaron en esta simulación.

		Escala agrícola (kg N ha ⁻¹ año ⁻¹)	Escala de cuenca (kg N ha ⁻¹ año ⁻¹)
Entradas	Fertilización	177	122
	Deposición atmosférica	6	6
	Mineralización	150	137
Salidas	Absorción por la vegetación	236	188
	Desnitrificación	17	13
	Pérdidas a través de los ríos	20	15

Tabla 3-10. Promedio anual de los flujos de N simulados (kg N ha⁻¹ año⁻¹) para el periodo 1-Ene-2009/31-Dic-2011.

3.2. RESULTADOS Y DISCUSIÓN: MODELIZACIÓN DEL NIVEL FREÁTICO CON SWAT

La única forma con la que se ha obtenido una buena simulación del nivel freático con el código SWAT, ha sido mediante el uso de una herramienta de autocalibración. Esta herramienta fue orientada hacia la minimización del valor de RMSE, para lo que se emplearon los valores de dos variables: El almacenaje de agua en el acuífero somero (*Shallow aquifer storage*, SA_ST) y el caudal. Así, se llevaron a cabo tres simulaciones distintas en las que la herramienta de autocalibración se orientó a la simulación del nivel freático (Autocal. 1; Tabla 3-11), a la simulación del caudal (Autocal. 2; Tabla 3-11) y a ambas variables (Autocal. 3; Tabla 3-11).

Con los valores de los parámetros obtenidos mediante esta metodología (Tabla 2-16 del apartado 2.4.2.1. *Calibración de los parámetros relacionados con los procesos hidrológicos*) se caracterizaron tres modelos diferentes de los cuales en la Tabla 3-11 se muestra el rendimiento en cuanto al nivel freático (SA_ST) y caudal.

	Variable empleada para minimizar el error	RMSE (SA_ST)	RMSE (Caudal)
Autocal. 1	SA_ST	0.06	0.67
Autocal. 2	Caudal	0.32	0.32
Autocal. 3	SA_ST + Caudal	0.27	0.32

Tabla 3-11. Valores estadísticos de las tres simulaciones obtenidas mediante auto calibración.

Los valores de la tabla indican que, como es lógico, las variables están mejor simuladas cuando éstas han sido consideradas durante el proceso de autocalibración. Ya que el uso de la herramienta de autocalibración se debió al interés por obtener una buena simulación del nivel freático, de los tres modelos, sólo se analizó en profundidad el enfocado a la simulación del nivel (caracterizado a través de los parámetros obtenidos por la simulación Autocal. 1). En la Figura 3-12, se muestra el nivel freático simulado para un pozo situado en la parte central de la cuenca (Arcaya). Como puede apreciarse, los valores simulados están muy próximos a los observados en la mayoría de ocasiones (R^2 : 0.6). No obstante, y como ya indica el RMSE del caudal simulado (0.67), la simulación del hidrograma empeoró considerablemente con respecto al modelo calibrado manualmente (NSE diario 0.45 frente a 0.54 en la etapa anterior).

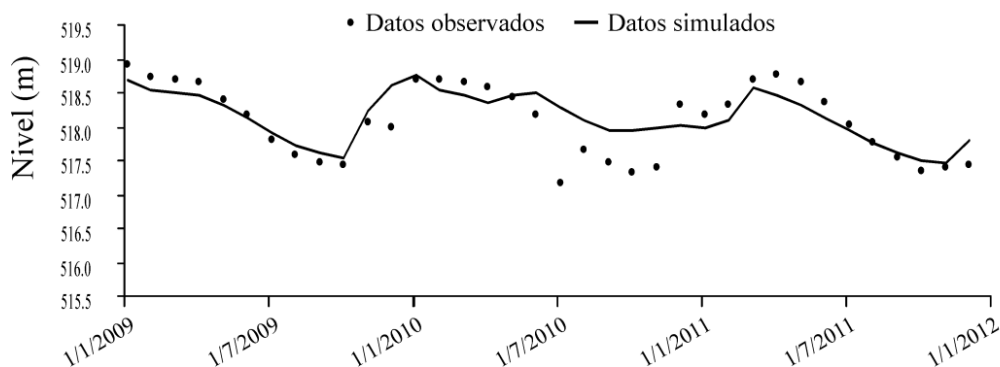


Figura 3-12. Datos observados y simulados de la variación mensual de nivel (m) en el pozo Arcaya.

En consecuencia, ya que el modelo SWAT es un modelo hidrológico, se consideró como mejor opción para simular los principales procesos a nivel de cuenca descartar el modelo obtenido mediante autocalibración y emplear para las posteriores etapas de este estudio el modelo obtenido mediante la calibración manual.

3.3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN: REPRESENTACIÓN DE LA VARIABILIDAD ESPACIAL CON SWAT

Para estudiar la variabilidad espacial con SWAT se disminuyó la potencia de los suelos con el objetivo de que una mayor potencia no supusiese una mayor magnitud de los procesos, concretamente, de la desnitrificación. Las consideraciones tomadas (apartado 2.4.1. *Set-up de los modelos SWAT y caracterización del sistema*) para construir un modelo con el que estudiar esta variabilidad trageron que otras variables simuladas también se viesan afectadas.

En cuanto a la exportación de agua se refiere, ésta aumenta con respecto a los resultados descritos durante la primera etapa del trabajo, tras modificar el ejecutable que tenía el error numérico. Así, para el periodo 21-Oct-2009/31-Dic-2011 ésta aumentó de 20 a 25 hm³, atribuido principalmente al menor espesor de los suelos, dando lugar a una menor retención hídrica que se traduce a la descarga de forma más rápida y mayor a la red de drenaje. Este modelo, simula una evapotranspiración de 396 mm año⁻¹ para el periodo 2009-2011, lo que supone la pérdida del 63% de la precipitación anual. Si bien es cierto que este valor es inferior al obtenido mediante el primer modelo (68%), además del efecto de la disminución de los suelos, que disminuye la disponibilidad hídrica para la vegetación, habría que considerar que el periodo 2009-2011 es considerado como un periodo seco (Cerro, 2013), estando, por lo tanto, la evapotranspiración de referencia mucho más limitada debido al déficit hídrico.

En cuanto al caudal diario simulado, los índices estadísticos indican una simulación satisfactoria (Van Liew y Garbrecht, 2003; Moriasi et al., 2007). En el periodo de calibración, a escala diaria el NSE y R² están cuantificados en 0.66 y 0.70, respectivamente, y durante el de validación, en 0.56 y 0.59 (Tabla 3-12).

Con este modelo, tampoco se consiguió simular de forma satisfactoria el nivel freático, y es por este motivo por lo que no se representa en el presente estudio.

	Caudal (m ³ s ⁻¹)				Carga de N (kg)			
	Diario		Mensual		Diario		Mensual	
	Cal.	Val.	Cal.	Val.	Cal.	Val.	Cal.	Val.
NSE	0.66	0.56	0.67	0.68	0.67	0.39	0.76	0.25
R²	0.70	0.59	0.84	0.74	0.68	0.56	0.86	0.65
PBIAS (%)	-16	-4	-16	-4	8	44	8	44
RSR	0.59	0.66	0.58	0.57	0.57	0.78	0.49	0.87

Tabla 3-12. Valores estadísticos de la simulación del caudal y carga de N del cuarto modelo SWAT.

En la Tabla 3-13 se muestran los flujos del ciclo del nitrógeno (kg ha⁻¹ año⁻¹) para el periodo 2009-2011, tanto calculados en base a la extensión agrícola (37 km²) como en base a toda la extensión de la cuenca (53 km²). Comparando estos flujos con los simulados anteriormente (mediante el segundo modelo descrito durante la primera etapa del trabajo), puede observarse que la mayor diferencia se da para el proceso de mineralización y absorción por la vegetación. En el primer caso, la mineralización disminuye de 150 a 91 kg N ha⁻¹ año⁻¹ y de 137 a 76 kg N ha⁻¹ año⁻¹ a escala agrícola y escala de cuenca, respectivamente. En el segundo, la absorción por la vegetación disminuye de 236 a 198 kg N ha⁻¹ año⁻¹ y de 188 a 147 kg N ha⁻¹ año⁻¹ a escala agrícola y escala de cuenca, respectivamente. El hecho de que la mineralización disminuya tan significativamente es atribuido a la caracterización de los suelos, los cuales son más profundos en el modelo descrito en el apartado 3.1.5. *Corrección de errores numéricos* (Tabla 3-10) y, por lo tanto, en su totalidad contienen mayor cantidad de carbono, no limitando la mineralización del nitrógeno orgánico y simulando una mineralización mayor. En el caso de la absorción de la vegetación, el descenso podría atribuirse a una menor zona radicular de la que absorber el nitrato, no obstante, es evidente que el hecho de que la menor mineralización contribuye a que el contenido de nitrato sea menor, por lo que la absorción, también desciende con respecto al modelo en el que la tasa de mineralización es mayor. Hay que destacar, que los valores simulados están dentro de un rango de mineralización aceptable (en tierras arables 40-180 kg N ha⁻¹ año⁻¹ de acuerdo con Krysanova et al., 2002), siendo de gran dificultad la elección del modelo que mejor simula este proceso.

		Escala agrícola (kg N ha ⁻¹ año ⁻¹)	Escala de cuenca (kg N ha ⁻¹ año ⁻¹)
Entradas	Fertilización	177	122
	Deposición atmosférica	6	6
	Mineralización	91	76
Salidas	Absorción por la vegetación	198	147
	Desnitrificación	18	14
	Pérdidas a través de los ríos	16	12

Tabla 3-13. Promedio anual de los flujos de N simulados (kg N ha⁻¹ año⁻¹) para el periodo 2009-2011.

A pesar de la gran diferencia en la cantidad de N mineralizada con respecto a los resultados anteriores, las pérdidas de N a través de los ríos son muy similares, siendo algo inferiores en este último caso (descienden de 20 a 16 kg N ha⁻¹ año⁻¹ y de 15 a 12 kg N ha⁻¹ año⁻¹ a escala agrícola y escala de cuenca, respectivamente).

De acuerdo con los índices estadísticos de la simulación de la exportación de carga de N, los resultados de este último modelo son satisfactorios a escala diaria (Tabla 3-12), estando cuantificados durante el periodo de calibración en 0.67 y 0.68 el NSE y R², respectivamente, y durante el periodo de validación, en 0.39 y 0.56.

La producción de todos los cultivos varía por encima de 1 t ha⁻¹ año⁻¹ durante los años consecutivos, siendo los cultivos que mayor variabilidad presentan en el periodo 1-Ene-2009/31-Dic-2011, aquellos de regadío. Se piensa que el factor que en mayor medida afecta a esta variabilidad puede ser el hecho de mantener constantes los momentos en los que se definen las prácticas agrícolas, ya que, en función de las características meteorológicas de cada año, el momento escogido para la fertilización o riego puede ser, o no, el adecuado para las condiciones de desarrollo determinadas en un año dado. Así, la producción anual media para el periodo descrito, está cuantificada en 7.1, 6.1, 8.8 y 16.7 t ha⁻¹ para los cultivos de cebada, trigo, patata y remolacha, respectivamente. En la Figura 3-13 se muestra con más detalle la variabilidad anual de la producción de cada cultivo.

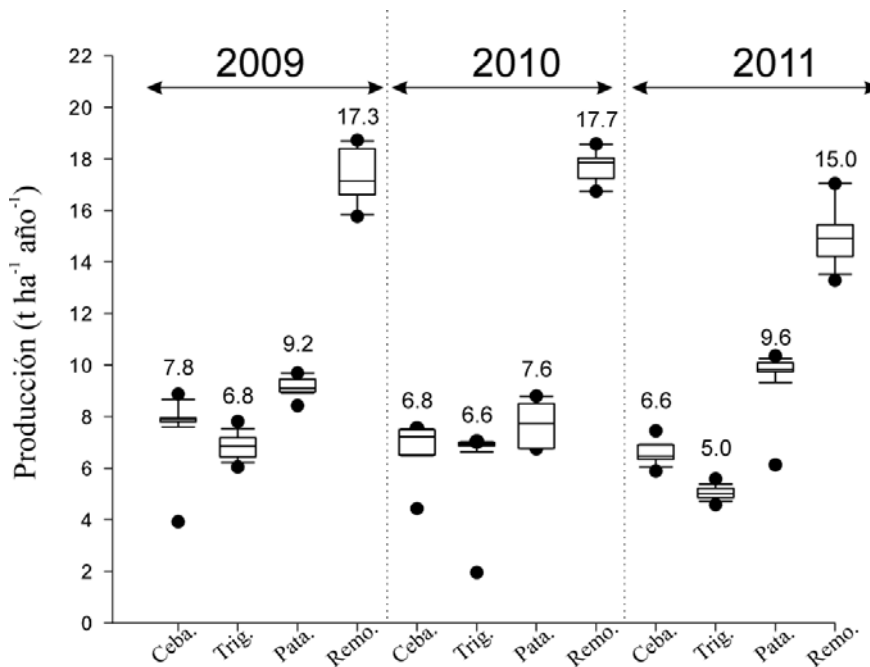


Figura 3-13. Simulación de la producción anual de los cultivos (t ha⁻¹ año⁻¹) durante los años 2009, 2010 y 2011. Los puntos indican los valores atípicos para cada caso.

Por último, en cuanto a la simulación del proceso de desnitrificación se refiere, este modelo simula para el periodo 2009-2011 una desnitrificación anual que oscila entre 13 y 15 kg N ha⁻¹ año⁻¹ a nivel de cuenca. Valores muy similares a los obtenidos por Ortuzar (2007), cuantificados en 10-14 kg N ha⁻¹ año⁻¹ en la misma zona de estudio. No obstante, habría que

considerar que el cambio de escala podría suponer que los valores simulados se alejasen de los reportados en la bibliografía, pues éstos fueron obtenidos para parcelas cultivadas, pudiendo ser su valor, por lo tanto, algo superior a un valor representativo a escala de cuenca. Estos resultados están tratados más detalladamente en el apartado 4.1.3.2. *Natural attenuation*.

3.4. CONCLUSIONES SOBRE LA MODELIZACIÓN CON SWAT

El código SWAT ha sido empleado para modelizar los efectos de los cambios en las prácticas agrícolas de las últimas décadas sobre los procesos hidrológicos y de calidad de las aguas en la cuenca del río Alegria. A continuación, se describen las principales conclusiones obtenidas, también discutidas posteriormente en los apartados 4.3. *Conclusiones sobre la modelización mediante diferentes aproximaciones numéricas* y 6.2.1. *Principal conclusions*.

Si bien es cierto que el proceso de modelización ha sido continuo, los objetivos específicos considerados durante este proceso han hecho que los resultados obtenidos hayan sido expuestos a través de distintas etapas, denominadas: Modelización del impacto de las prácticas agrícolas, Modelización del nivel freático y Representación de la variabilidad espacial.

Mediante la **modelización del impacto de las prácticas agrícolas**, con las simplificaciones consideradas en cuanto a los usos de los suelos e itinerarios técnicos se refiere, se ha conseguido simular de forma satisfactoria el caudal, la exportación de carga de N y la producción de cultivos, tal y como lo demuestran los índices estadísticos empleados para su evaluación. Además, se han cuantificado los principales procesos del ciclo del nitrógeno, los cuales, diferenciados para los periodos 1990-1999 y 2000-2011, han dejado de manifiesto la importancia de la gestión agrícola, así como de las condiciones meteorológicas sobre el balance de nutrientes y, por lo tanto, sobre la calidad del medio estudiado.

Como ya se ha recogido anteriormente en la literatura, la cuantificación de los procesos de transformación del nitrógeno depende significativamente de las características asignadas a los suelos, tales como la profundidad de éste o su contenido de carbono orgánico. Si bien es cierto que en la realidad la variabilidad espacial de la altura o profundidad del nivel freático puede traer una mayor variabilidad espacial del contenido hídrico de los suelos que repercute sobre los procesos mencionados, el hecho de que SWAT considere el acuífero mediante parámetros empíricos en lugar de parámetros físicos, hace que generalmente el compartimento "acuífero" en SWAT esté definido mediante los mismos valores a lo largo de toda la zona de estudio. Teniendo en cuenta, además, la conceptualización semi-distribuida que tiene el código (ausencia de interacción entre HRUs adyacentes y consideración espacial mediante la distancia entre las HRUs y el *outlet* de la subcuenca correspondiente), se entiende la razón por la que la representatividad espacial de los modelos construidos con SWAT está bastante limitada.

En efecto, el código SWAT fue creado para simular la exportación de agua y nutrientes de cuencas agrícolas, variables que, generalmente, son fácilmente simuladas mediante una parameterización simple del modelo. En este estudio, además de estas variables, también se ha conseguido simular la concentración de nitratos en el agua subterránea, lo que se ha calculado

ponderando a la extensión de cada HRU el volumen de agua y carga de N exportada a través de éstas a los canales. No obstante, conviene destacar que esta simulación ha sido únicamente satisfactoria mediante un modelo en el que se consideran suelos con una mayor potencia, lo que acarrea una cantidad más elevada de nitrógeno mineralizado que hace que durante los meses de verano (periodo en el que se dan condiciones meteorológicas adecuadas para que ocurra este proceso: temperatura y aireación de los suelos) la cantidad de nitrógeno exceda las necesidades de la vegetación, siendo lixiviado al acuífero y, posteriormente, transportado a los ríos. En este caso, la carga de nitrógeno es suficientemente elevada como para simular una concentración de nitratos equiparable a los datos observados.

En lo que a la **simulación del nivel freático** se refiere, siendo en realidad la fluctuación del mismo, en el presente estudio sólo se ha obtenido una simulación satisfactoria de esta variable mediante una herramienta de autocalibración. Hay que destacar, no obstante, que su ajuste descendía significativamente el rendimiento de una de las variables de estudio, el caudal, siendo este el motivo por el que este modelo fue descartado para un estudio más exhaustivo de los resultados. En este punto, es necesario considerar que mediante la herramienta de autocalibración se obtienen únicos valores para los diferentes parámetros analizados y que, por ello, la fluctuación del nivel freático era muy similar a lo largo de toda la cuenca. Por este motivo se cree que mediante una calibración manual enfocada a diferentes zonas se podría conseguir una mejor representación espacial de esta variable pero el hecho de que los parámetros que definen los procesos hidrogeológicos no sean físicos, como se ha mencionado, hace que este tipo de calibración sea realmente costosa.

Durante la última etapa de trabajo abarcada, donde se ha procurado obtener una simulación de la **variabilidad espacial** de los procesos, se ha procurado disminuir la influencia de las características asignadas a los suelos sobre los procesos de transformación del nitrógeno, para lo que se ha disminuido su potencia y se ha establecido una misma concentración de carbono en el primer metro superficial. Este cambio trae que la cuantificación de los procesos dependa de la variabilidad meteorológica espacial, la variabilidad espacial de las prácticas agrícolas y de la variabilidad espacial de los suelos.

Mediante una caracterización más detallada del contenido de carbono orgánico de los suelos y de los parámetros relacionados con la desnitrificación, se obtuvo una menor mineralización del nitrógeno. Esto afectó directamente a la exportación de nitrógeno, simulando una exportación menor durante los meses de verano que llegaba a descender la concentración de nitratos del acuífero, y a la absorción de N por la vegetación, que, considerando una absorción hídrica menor debida a la menor potencia de los suelos, hizo que la producción simulada también descendiese.

En cualquier caso, cabe destacar que los procesos de transformación del nitrógeno son evaluados mediante rangos generales obtenidos de la bibliografía y, por ello, resulta de gran dificultad evaluar cuales son los modelos óptimos en estudios a nivel de cuenca. En este tipo de modelos, la simulación de procesos como la mineralización, desnitrificación o absorción por la vegetación suele darse por satisfactoria si su valor está dentro de los rangos bibliográficos, quedando el proceso de calibración del modelo orientado a la simulación de la exportación de nutrientes.

3.5. REFERENCES

- 2000/60/EC, 2000. Directive 2000/60/EC concerning the establishment of a framework for Community action in the field of water policy. OJ L327. pp.8.
- 91/676/EEC, 1991. Directive 91/676/EEC concerning waters against pollution caused by nitrates from agricultural sources. OJ L135. pp.73.
- Arnold, J.G., Srinivasan, R., Muttiah, R.S. and Williams, J.R., 1998. Large area hydrologic modeling 4 and assessment: Part I. Model development. *Journal of the American Water Resources Association*, 34(1): 73-89.
- Arrate, I., 1994. Estudio hidrogeológico del acuífero cuaternario de Vitoria-Gasteiz (Araba, País Vasco). Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Arrate, I., Sánchez-Pérez, J.M., Antigüedad, I., Vallecillo, M.A., Iribar, V. and Ruiz, M., 1997. Groundwater pollution in Quaternary aquifer of Vitoria-Gasteiz (Basque Country, Spain). *Environmental Geology*, 30(3-4): 257-265.
- Behera, S. and Panda, R.K., 2006. Evaluation of management alternatives for an agricultural watershed in a sub-humid subtropical region using a physical process based model. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 113: 62-72.
- Bhat, S., Hatfield, K., Jacobs, J.M., Lowrance, R. and Williams, R., 2007. Surface runoff contribution of nitrogen during storm events in a forested watershed. *Biogeochemistry*, 85: 253-262.
- Bijay-Singh, Yadvinder-Singh, and Sekhon, G.S., 1995. Fertilizer-N use efficiency and nitrate pollution of groundwater in developing countries. *Journal of Contaminant Hydrology*, 20: 167-184.
- Boithias, L., Srinivasan, R., Sauvage, S. and Sánchez-Pérez J.M., 2014. Daily nitrate losses: implication on long-term river quality in an intensive agricultural catchment of southwestern France. *Journal of Environmental Quality*, 43(1): 46-54.
- Borah, D.K., and Bera, M., 2003. Watershed-scale hydrologic and non-point source pollution models: review of mathematical bases. *Transactions of the ASAE*, 46(6): 1553-1566.
- Bracmort, K.S., Arabi, M., Frankenberger, J.R., Engel, B.A. and Arnold, J.G. 2006. Modeling Long-Term Water Quality Impact of Structural BMPs. *Transactions of the ASABE*, 49(2): 367-374.
- Burkart, M., James, D., Liebman, M. and Herndl, C., 2005. Impacts of integrated crop-livestock systems on nitrogen dynamics and soil erosion in western Iowa watersheds. *Journal of Geophysical Research*, 110 (G01009).
- Castaldelli, G., Soana, E., Racchetti, E., Pierobo, E., Mastrocicco, M., Tesini, E., Fano, E.A. and Bartoli, M., 2013. Nitrogen budget in a lowland coastal area within the Po river basin (Northern Italy): Multiple Evidences of Equilibrium Between Sources and internal sinks. *Journal of Environmental Management*, 52: 567-580.
- Cerro I., Sanchez Perez, J.M., Ruiz-Romera E. and Antigüedad, I., 2014a. Variability of particulate (SS, POC) and dissolved (DOC, NO₃) matter during storm events in the Alegria agricultural watershed. *Hydrological Processes*, 28 (5): 2855-2867.
- Cerro, I., 2013. Impacto de las crecidas en la calidad del agua (Cuenca agrícola del río Alegria, País Vasco). Aplicación del modelo agro-hidrológico SWAT. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Cerro, I., Antigüedad, I., Srinivasan, R., Sauvage, S., Volk, M. and Sánchez-Pérez, J.M., 2014b. Simulating land management options to reduce nitrate pollution in an agricultural watershed dominated by an alluvial aquifer. *Journal of Environmental Quality*, 43(1): 67-74.
- Exner, M.E., Perea-Estrada, H. and Spalding, R.F., 2010. Long-term response of groundwater nitrate concentrations to management regulations in Nebraska's central platte valley. *The Scientific World Journal*, 10: 286-297.
- Ferrant, S., Durand, P., Justes, E., Probst, J.L. and Sánchez-Pérez, J.M., 2013. Simulating the long term impact of nitrate mitigation scenarios in a pilot study basin. *Agricultural Water Management*, 124: 85-96.
- Ferrant, S., Oehler, F., Durand, P., Ruiz, L., Salmon-Monviola, J., Justes, E., Dugast, P., Probst, A., Probst J.L. and Sánchez-Pérez, J.M., 2011. Understanding nitrogen transfer dynamics in a small agricultural catchment: Comparison of a distributed (TNT2) and a semi distributed (SWAT) modeling approaches. *Journal of Hydrology*, 406: 1-15.

- Gassman, P.W., Reyes, M.R., Green, C.H. and Arnold, J.G., 2007. The soil and water assessment tool: historical development, applications and future research directions. *Transactions of the ASABE*, 50(4): 1211–2150.
- Green, C.H., Tomer, M.D., Di Luzio, M. and Arnold, J.G., 2006. Hydrologic evaluation of the soil and water assessment tool for a large tile-drained watershed in Iowa. *Transactions of the ASABE*, 49(2): 413–422.
- Huang, M., Gallichand, J., Dang, T. and Shao, M., 2006. An evaluation of EPIC soil water and yield components in the gully region of Loess Plateau, China. *The Journal of Agricultural Science*, 144: 339-348.
- Iñiguez, J., Sánchez-Carpintero, I., Val, R.M., Romeo, A. and Bascones, J.C., 1980. Mapa de suelos de Alava. Vitoria-Gasteiz: Diputación Foral de Alava-Departamento de Edafología de la Universidad de Navarra.
- Jégo, G., Martínez, M., Antigüedad, I., Launay, M., Sánchez-Pérez, J.M. and Justes, E., 2008. Evaluation of the impact of various agricultural practices on nitrate leaching under the root zone of potato and sugar beet using the STICS soil-crop model. *Science of the Total Environment*, 394: 207-221.
- Kenneth, J. and Hellevang, P.E., 1995. Grain Moisture Content Effects and Management. NDSU Extension Service. North Dakota State University. Fargo, ND 58105.
- Koch, F.J., Griensven, A.V., Uhlenbrook, S., Tekleab, S. And Teferi, E., 2012. The Effects of Land use Change on Hydrological Responses in the Choke Mountain Range (Ethiopia)- A new Approach Addressing Land Use Dynamics in the Model SWAT. In: International Environmental Modelling and Software Society (IEMSs). Leipzig, Germany. 1-5 July.
- Krysanova, V. and Haberlandt, U. (2002) Assessment of nitrogen leaching from arable land in large river basins. Part I. Simulation experiments using a process-based model. *Ecological Modelling*, 150: 255-275.
- Lam, Q.D., Schmalz B. and Fohrer, N., 2010. Modelling point and diffuse source pollution of nitrate in a rural lowland catchment using the SWAT model. *Agricultural Water Management* 97: 317-325.
- Lam, Q.D., Schmalz, B. and Fohrer, N., 2011. The impact of agricultural best management practices on water quality in a north German lowland catchment. *Environmental Monitoring and Assessment*, 183: 351-379.
- LIDAR map of the Basque Country, 2008. Available at www.neuskadi.net.
- Liu, R., Zhang, P., Wang, X., Chen, Y. And Shen, Z. 2013. Assessment of effects of best management practices on agricultural non-point source pollution in Xiangxi River watershed. *Agricultural Water Management*, 117: 9-18.
- Martínez, M., 2008. Dinámica espacio-temporal de la calidad de las aguas de la Zona Vulnerable de Vitoria-Gasteiz (País Vasco). Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Moriasi, D.N., Arnold, J.G., Van Liew, M.W., Bingner, R.L., Harmel, R.D. and Veith, T.L., 2007. Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations. *Transactions of the ASABE*, 50(3): 885-900.
- Moulin, A.P. and Beckie, H.J., 1993. Evaluation of the CERES and EPIC models for predicting spring wheat grain yield over time. *Canadian Journal of Plant Science*, 73: 713-719.
- Nair S., King, K.W., Witter, J.D., Sohngen B.L. and Fausey, N.R., 2011. Importance of crop yield in calibrating watershed water quality simulation tools. *JAWRA Journal of the American Water Resources Association*, 47(6): 1285-1297.
- NDSU, 2006. Sugar Beets Can Make Good Silage. North Dakota State University. Plant Management Network. Available at: www.plantmanagementnetwork.org. Accessed 17 November 2006.
- Neitsch, S.L., Arnold, J.G., Kiniry, J.R., Williams, J.R. and King, K.W., 2011. Soil and Water Assessment Tool theoretical documentation, version 2009. Grassland, Soil and Water Research Laboratory, Agricultural Research Service, Temple, TX.
- Oeurng, C., Sauvage S. and Sánchez-Pérez, J.M., 2010. Temporal variability of nitrate transport through hydrological response during flood events within a large agricultural catchment in south-west France. *Science of the Total Environment*, 409: 140-149.
- Ortuzar, M.A., 2007. Desarrollo de un sistema de fertilización nitrogenada racional en trigo blando de invierno bajo condiciones de clima mediterráneo húmedo. Thesis (PhD). University of the Basque Country-Neiker.

- Pikounis, M., Varanou, E., Baltas, E., Dassaklis, A. and Mimikou, M., 2003 Application of the SWAT model in the Pinos river basin under different land use scenarios. *Global Nest Journal*, 5 (2), 71-79.
- Runkel, R.L., Crawford, C.G. and Cohn, T.A., 2004. Load Estimator (LOADEST): A FORTRAN Program for Estimating Constituent Loads in Streams and Rivers. U.S. Geological Survey.
- Sánchez-Pérez, J.M., Antigüedad, I., Arrate, I., García-Linares, C. and Morell, I., 2003. The influence of nitrate leaching through unsaturated soil on groundwater pollution in an agricultural area of the Basque Country: a case study. *Science of the Total Environment*, 317: 173-187.
- Saxton, K.E. and Rawls, W.J., 2009. Soil Water Characteristics: Hydraulic properties calculator [Computational program]. USDA Agricultural Research Service. Version 6.02.74.
- Scanlon, M., 2005. Botany of the Potato Plant. In Bains, P. (Ed) *Guide to Commercial Potato Production on the Canadian Prairies*. Agriculture and Rural Development of Alberta.
- Schmalz, B., Tavares, F. and Fohrer, N., 2007. Assessment of nutrient entry pathways and dominating hydrological processes in lowland catchment. *Advances in Geosciences*, 11: 107-112.
- Srinivasan, R., Zhang, X. and Arnold, J., 2010. SWAT ungauged: Hydrological budget and crop yield predictions in the upper Mississippi river basin. *Transactions of the ASABE*, 53(5): 1533-1546.
- Tyler, K.B., Broadbent, F.E. and Bishop, J.C., 1983. Efficiency of nitrogen uptake by potatoes. *American Potato Journal*, 60(4): 261-269.
- Van Liew, M.W. and Garbrecht, J., 2003. Hydrologic simulation of the little Washita river experimental watershed using SWAT. *Journal of American water Resources Association*, 39(2): 413-426.
- Wang, S., Kang, S., Zhang, L. And Li, F., 2008. Modelling hydrological response to different land-use and climate change scenarios in the Zamu River basin of northwest China. *Hydrological Processes*, 22: 2502-2510.
- Williams, J.R., Jones, C.A., Kiniry, J.R. and Spanel, D.A., 1989. The EPIC crop growth model. *Transactions of the ASAE*, 32: 497-511.
- Winchell, M., Srinivasan, R., Di Luzio, M. and Arnold, J.G., 2007. ArcSWAT interface for SWAT2005- User's guide. Blackland Research Center, Texas Agricultural Experiment Station and Grassland, Soil and Water Research Laboratory, USDA Agricultural Research Service, Temple, Texas.
- Winter, T.C., 1981. Uncertainties in estimating the water balance of lakes. *Journal of the American Water Resources Association*, 17(1): 82-115.
- Wriedt, G. and Rode, M., 2006. Modelling nitrate transport and turnover in a lowland catchment system. *Journal of Hydrology*, 328: 157-176.
- Zhang, Y.B., Zheng, F.L. and Cao, N., 2010. Effect of saturated near surface on nitrate and ammonia nitrogen losses in surface runoff at the loess soil hillslope. *International Journal of Chemical Engineering*, 2010: 1-7.

4.



SIMULACIÓN DE PROCESOS HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD MEDIANTE DIFERENTES APROXIMACIONES NUMÉRICAS

- 4.1. NITROGEN TRANSPORT AND TURNOVER MODELING AT THE WATERSHED SCALE IN A NITRATE VULNERABLE ZONE**
- 4.2. RESULTADOS COMPLEMENTARIOS DEL MODELO MOHID Y DISCUSIÓN**
- 4.3. CONCLUSIONES SOBRE LA MODELIZACIÓN MEDIANTE DIFERENTES APROXIMACIONES NUMÉRICAS**

4. SIMULACIÓN DE PROCESOS HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD MEDIANTE DIFERENTES APROXIMACIONES NUMÉRICAS

En este capítulo, se exponen los resultados obtenidos mediante un modelo físico (MOHID) comparados con los resultados obtenidos de un modelo conceptual (SWAT). Para llevar a cabo este estudio se ha empleado el modelo construido mediante SWAT orientado a la representación de la variabilidad espacial, descrito en el apartado 3.3. *Resultados y discusión: Representación de la variabilidad espacial con SWAT*. El objetivo de esta comparativa entre los modelos ha sido evidenciar cual de los modelos es capaz de representar los procesos hidrológicos, la transformación y el transporte de nutrientes de una forma más adecuada, lo que queda recogido bajo una publicación enviada a una revista internacional (JCR).

Adicionalmente, se exponen otros resultados obtenidos mediante el modelo físico que quedan fuera del marco de la comparativa y se describe el análisis de sensibilidad llevado a cabo mediante este mismo modelo.

4.1. DIFFERENCES IN WATERSHED SCALE PROCESSES MODELING BY A PHYSICS-BASED MODEL AND A CONCEPTUAL MODEL

El contenido de este apartado ha sido objeto de un artículo enviado a la revista *Environmental Modelling and Software*, de título: **Nitrogen transport and turnover modeling at the watershed scale in a nitrate vulnerable zone** (En revisión). A continuación, se expone el contenido del mismo.

Abstract Different modeling approaches have been used in recent decades to study the water quality degradation caused by non-point source pollution. In this study, two models were applied to simulate nitrogen dynamics in a nitrate vulnerable zone: the semi-distributed SWAT model and the fully distributed MOHID model. The results indicated that both models showed a satisfactory performance at simulating the hydrological processes and nitrogen load exportation, with those obtained using MOHID showing a better performance. Indeed, both models were used to assess how model structure can influence a spatial representation of the denitrification process and it was observed that, whereas at the watershed scale both models simulated the denitrification process according to the field data (13-15 kg ha⁻¹ year⁻¹ and 9-10 kg ha⁻¹ year⁻¹ in the case of SWAT and MOHID, respectively), at plot scale, the MOHID model gave more accurate results.

4.1.1. Introduction

In recent decades, hydrological and water quality models have become essential tools for water resources planning, development and management; they have improved the understanding of hydrological systems and helped assess the impact of different changes (e.g., climate and land use). Because of the difficulties representing the hydrological system's heterogeneity and complexity (Wagener, 2007), in numerical models a different degree of process simplification must be assumed (Meyer and Gee, 1999), leading to a large variety of numerical models. In agreement with Wheeler et al. (1993), we distinguish between metric, conceptual or empirical, and physics-based and fully distributed models. It is commonly accepted that the more realistic a model attempts to be, the more complex and higher its data demand (Beven, 1989), with the simplest models being limited in their ability to represent natural processes (Wheeler et al. 1993). Metric models are statistical relationships that relate an input data set to an output data set, and because of their simplicity their representation of real processes is fairly limited. For this reason, metric models usually are applied on broad spatio-temporal scales (Johnes, 1996). Conceptual or empirical models, because of their simplicity from a mathematical perspective (Güntner et al. 1999), are generally easy to apply. They can be spatially lumped or semi-distributed and they involve specifying a model structure, normally based on conceptual stores characterized by a set of empirical parameters obtained by calibration, which are often derived through the simplification of physical processes (Jackson et al. 2007). Fully distributed physics-based models were considered to be more suitable for

simulating land use changes and predicting hydrology (Abbot et al. 1986) because they work with field measurable data, but their demand for a large quantity of data, which usually is not available (Beven, 2000), led to the need for calibration. It is essential therefore, to evaluate the available data and objectives of the modeling process to find the model that best represents the needs of the study.

Behind different contexts, both conceptual and physics-based models have been proven to be efficient tools for studying the effect of water resources management scenarios, to enable predictions in ungauged basins and to assess the impact of possible future changes in climate and land use (Aghakouchak and Habib, 2010; Pechlivanidis et al. 2011). Indeed, with the significant growth in computational power in recent decades, many watershed-scale models have been developed with the aim of simulating hydrological processes, crop growth, and nutrient transport and transformation. However, many of the most powerful models do not include all of the processes that occur at the watershed scale, leading to the indispensable coupling of different models to conduct integrated watershed scale studies. Examples of model coupling that have recently appeared in the literature include: MIKE SHE-DAISY (Styczen and Storm, 1993), SWAT-MODFLOW (Kim et al. 2008) and ISBA-TOPMODEL (Vincendon et al. 2010).

This study presents the simulation of hydrological processes and nutrient transport and the turnover by two integrated models belonging to different modeling approaches - one, a semi-empirical and semi-distributed model, Soil and Water Assessment Tool (SWAT) (Arnold et al. 1998), and the other, a physical model based on fluid mechanics, MOdelo HIDrodinâmico (MOHID) (Neves, 1985).

SWAT is considered to be one of the most widely used water quality watershed scale models, registering multiple decades of model development (Gassman et al. 2007). It is supported by online documentation and resources, interface tools and other supporting software (Gassman et al. 2014) (swat.tamu.edu).

MOHID, which first focused on estuarine and coastal waters simulation, has evolved significantly in recent years and is currently considered a powerful water modeling system that can simulate 1D river networks, 2D basins and 3D estuarine and coastal waters and soil processes (Trancoso et al. 2009). The model is divided into three main executables: MOHID Water, MOHID River Network and MOHID Land, of which the latter has been in full development since its appearance in 2004 (Braunschweig et al. 2004). The model is supported by online documentation and different pre- and post- processing tools (www.mohid.com).

Thus, we aim to take advantage of the differences in the modeling approaches of SWAT and MOHID, to assess their weaknesses and strengths. And rather than perform a comparison between the two models, we study the results to better understand the implications of using different methodologies. Accordingly, our specific objectives are to (i) develop a MOHID model to be able to simulate the watershed's hydrological and nutrient transport and transformation processes; (ii) test the SWAT's performance on river and aquifer N concentration simulation; (iii) compare both models' spatial and temporal variability on the denitrification process simulation and (iv) identify the strengths and weaknesses of the SWAT and MOHID with regard to the processes' simulation at the watershed scale.

4.1.2. Materials and methods

4.1.2.1. STUDY AREA

The Alegria River watershed (115 km²) is a sub-basin of the Ebro River basin located in the Basque Country (4-1). The watershed exhibits topographic differences, ranging from 1157 m in the southern part to 507 m in the northwest. Although the annual mean precipitation in the area is 625 mm (for the period 1986-2011), the study period (2009-2011) was considered to be somewhat dry - on average, only 550 mm year⁻¹ were registered. Indeed, higher precipitation is registered when the altitude increases, with autumn being the wettest month. The annual mean temperature is 11°C, with minimum and maximum temperatures of approximately -5°C and 12°C, and 8°C and 32°C, in winter and summer, respectively.

The superficial water of the upper part of the watershed is derived through the Alegria Channel to a reservoir located to the north, beyond the watershed. In fact, this study focuses on the lower part of the watershed, considering an extension of approximately 53 km². Downstream, there is only one gauging station located at the outlet of the watershed, and several wells are placed throughout the study area (Figure 4-1).

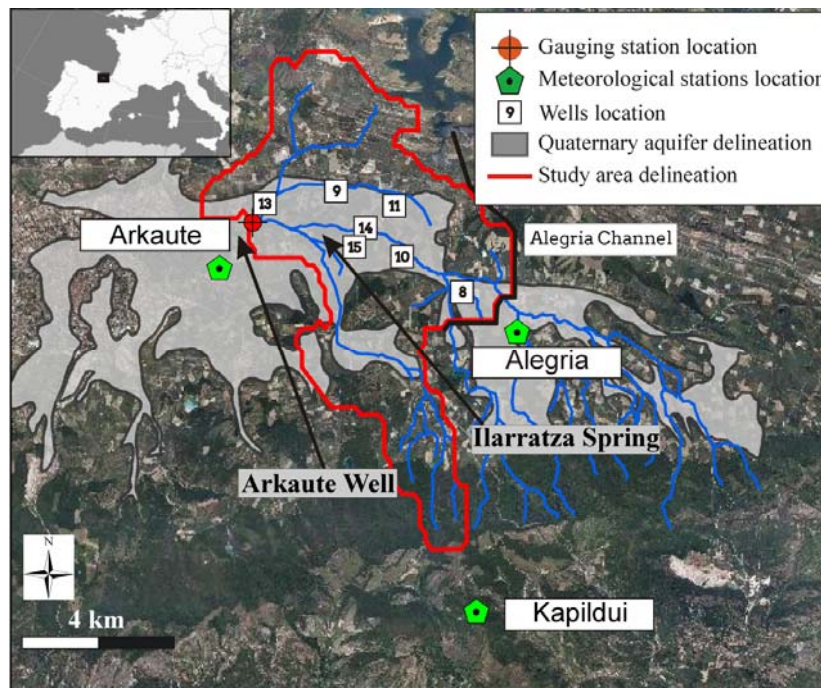


Figure 4-1. Localization of the study area, meteorological and gauging stations and wells.

The underlying materials are Quaternary-aged fluvial and alluvial deposits (alluvial aquifer) that lay over impermeable marls. Due to the low thickness of the aquifer upstream the Alegria Channel as well as its base is located almost over the underlying marls (Arrate, 1994; Cerro, 2013) it is assumed that there is no lateral flow through the aquifer. The most dominant soil types in the catchment are Vertisol, Cambisol and Rendzina, with loam, silty loam and clay loam being the most frequent textural classes. The aquifer plays an important role both in terms of the hydrology and nitrate pollution (Arrate et al. 1997). The shallow water table (0-3 m)

creates head gradients that causes the groundwater to be the primary contributor of river discharge during some months of the year (Cerro, 2013).

The major part of the study area consists of agricultural land use; the dominant crops are composed of cereals (wheat, oats and barley) and, to a lesser degree, irrigated potatoes and sugar beets. The most common agricultural practices consist of crop rotations between cereals or between cereals and irrigated crops to which annual top and dressing fertilization doses are usually applied.

Because of the agricultural management performed in recent decades, consisting primarily of the application of high fertilizer doses and the recirculation of nitrates with the groundwater used for irrigation (Sánchez-Pérez et al. 2003a), the study area has suffered nitrate-related problems since the 1990s when it was declared a Nitrate Vulnerable Zone. In subsequent years, the implementation of environmental regulations and the farmers' awareness caused the groundwater nitrate concentration (that had reached 200 mg NO₃ l⁻¹ at the beginning of the 1990s; Sánchez-Pérez et al. 2003a) to decrease significantly. Today, the concentration values are generally below the nitrate limit according to the Nitrate Directive of the European Commission (50 mg NO₃ l⁻¹).

4.1.2.2. MODEL COMPARISON

One of the primary differences between the SWAT and MOHID is the spatial discretization and therefore, the way they conceptualize and formalize every process. The SWAT divides the watershed into sub-basins connected by a stream network and further delineates each sub-basin into hydrologic response units (HRUs), which consist of unique combinations of land cover, slope and soil type, and are not spatially referenced. This model simulates each HRU separately and it is assumed that there is no interaction between the HRUs (Srinivasan et al. 2010). Soil water transfer is driven by a storage routing technique (Vazquez-Amabile and Engel, 2005) and groundwater flow is controlled by empirical parameters.

The MOHID discretizes the watershed into a regular cell grid scheme. The flow between cells, both in saturated and non-saturated zones is governed by hydraulic gradients and calculated by Richard's equation. The surface water transport (2D in surface waters and 1D in river channels) is computed by complete St. Venant equations and the fluxes to porous media are according to the hydraulic gradients (Trancoso et al. 2009).

The SWAT allows choosing between different methods for evapotranspiration calculation based on the Leaf Area Index of the vegetation. The MOHID calculates the evapotranspiration using the Penman-Monteith method and it limits the process with Crop Coefficient, Leaf Area Index and Feddes Parameters (Feddes et al. 1978). For the separation between runoff and infiltration, whereas SWAT uses the Curve Number method (USDA-SCS, 1972), the MOHID computes infiltration using the same equation as in soil (Richard's equation).

Different simplifications are made by the models for nutrient transformation process simulation. The SWAT characterizes the soil organic matter (OM) as nitrogen and it considers soil carbon as a static content (Gassman et al. 2007). The model distinguishes five different pools of N, corresponding to organic (Fresh organic N, Stable N and Active N) and mineral forms

(Ammonia, N-NH₄ and Nitrate, N-NO₃). Although with the MOHID model it is possible to simulate complex cycles of C, N and P, because of the high computational time requirements and the model's process decoupling impossibility, a simplified approach based on the work by Peyrard et al. (2011) was used to simulate the denitrification process. For this approach, two organic pools (Labile Dissolved Organic Carbon, DOC; and Particulate Organic Carbon, POC) and one mineral pool (Nitrate, N-NO₃) represent the soil organic matter.

Considering how the difference in organic matter turnover simulation affects this study, only the differences regarding mineralization and denitrification are evidenced. The mineralization of nitrogen in the SWAT is considered to be from the Active organic pool, which is associated with the soil humus, and from the Fresh organic pool, which is associated to crop residue. The former is calculated from a rate coefficient specified by the user (CMN) and the nutrient cycling temperature and water factors. The mineralized amount is added to the Nitrate pool. The latter is calculated from a rate coefficient specified by the user (RSDCO) and the nutrient cycling residue composition, temperature and water factors. 80% of the mineralized amount is added to Nitrate pool and 20% is added to the Active N pool.

The simplified methodology used in the MOHID for the organic matter turnover does not consider the mineralization process and, therefore, an extra input has to be factored for the MOHID model to simulate the mineralization process, which was based on the SWAT simulated results. Regarding denitrification, the SWAT calculates the N loss resulting from this process based on the layer amount of nitrate and carbon and the nutrient cycling temperature factor, as well as a rate coefficient specified by the user (CDN) and the threshold of the water content for denitrification to occur (SDNCO).

The denitrification adaptation from Peyrard et al. (2011) requires the consideration of the anaerobic degradation of organic carbon in both particulate and dissolved forms, which is simulated according to equations 1, 2 and 3.

$$R_{POC} = -k_{POC} * [POC] \quad (4-1)$$

$$R_{DOC} = -k_{DOC} * [DOC] \quad (4-2)$$

$$R_{NO_3} = -0.8 * \left(\rho \frac{1-\phi}{\phi} * k_{POC} * [POC] * \frac{10^6}{M_c} + k_{DOC} * [DOC] \right) * \frac{[NO_3]}{k_{NO_3} + [NO_3]} * T_{anaero} \quad (4-3)$$

Where:

R_{POC} is the degraded amount of POC (mg g⁻¹ d⁻¹),

k_{POC} is the decay rate of POC (d⁻¹),

[POC] is the concentration of POC (mg g⁻¹),

R_{DOC} is the degraded amount of DOC (μM d⁻¹),

k_{DOC} is the decay rate of DOC (d⁻¹),

[DOC] is the concentration of DOC (μM),

R_{NO_3} is the degraded amount of nitrate (μM d⁻¹),

ρ is the density (kg dm⁻³),

ϕ is the porosity (cm³ cm⁻³),

M_c is the molecular weight of the carbon (g mol⁻¹),

k_{NO_3} is the half saturation of the nitrate (μM),

[NO₃] is the concentration of NO₃ (μM)

T_{anaero} is the anaerobiose term (-).

Apart from the denitrification equations themselves, it must be noted that the way each model considers anaerobic conditions (represented by the SDNCO parameter in SWAT and the T_{anaero} factor in MOHID) is also different. Whereas the SWAT model considers anaerobic conditions when the θ/θ_{FC} fraction is higher than the value specified for SDNCO, with θ being the water content of the layer and θ_{FC} the water content at field capacity (which depends on the Available Water Content (AWC), percent of clay content and bulk density), the MOHID model calculates the anaerobiose factor based on the RZWQM model (Shaffer et al. 1999), according to Equation 4.

$$T_{anaero} = 0.000304 * \exp(0.0815 * \theta_{rel} * 100) \quad (4-4)$$

Where:

T_{anaero} is the anaerobiose factor (-),

θ_{rel} is the relative water content (-).

These differences between the models carry a different amount of denitrification, which not only differs in the total annual N losses but also in the temporal distribution of the process.

The vegetation growth simulation of the MOHID model was coded based on the SWAT agro-hydrological model, which was based at the time on the EPIC crop growth model (Williams, 1975). The SWAT and MOHID models allow simulating common agricultural practices (including planting, grazing and harvesting), simulating the input of nutrients to the system (as fertilizers) and their transport both into the plant system (plant nutrient uptake) and into the porous media (nutrient leaching).

4.1.2.3. COMPARISON OF MODEL OUTPUT

Each model generates a type of output that not only differs in the file format but in the integration of the results. The SWAT stores the data in text files that, depending on the output step (daily, monthly or annual), have integrated the reach, HRU and sub-basin data of the given period. This enables operating with variables at the watershed scale in a clear and easy way. The MOHID stores the data as ASCII files (time series of a variable at a given point) and HDF5 binary format files (matrix data).

Apart from the format, the main difference with regard to the SWAT generated output is the lack of integrated values. This signifies that the outputs are generally written in a user specified step, but these values being instantaneous ones cannot be used to compute any type of balance (water or nutrient balance).

Nonetheless, in the last versions of the code some integrated outputs have been incorporated, which can be used to obtain water balances and the integrated discharge for the selected time interval. Although the model outputs are being constantly upgraded and improved, a nutrient balance or integrated mass fluxes at the watershed scale are not available yet for the MOHID model.

4.1.2.4. PREPARATION OF INPUT DATA FOR THE MODELS

General setup

As a first step, both models require the spatial discretization be defined. For the SWAT model, the watershed was divided into 66 sub-basins and 590 HRUs. The executable SWAT2012.rev622 was used and the watershed parameterization and the model input were conducted using the ArcSWAT Interface (ArcSWAT Version 2009.93.7b) for ArcGIS (Winchell et al. 2007). For the MOHID model, a grid with cell size of 0.002x0.002^o (approximately 200x200 m) was defined, amounting to a total of 1438 cells in the topmost layer. The executable version Rev.89008 was used and the parameterization and model input were performed using the MOHID Studio Interface 1.2.7.566 (Braunschweig et al. 2011).

Meteorological data

For the SWAT simulation, daily precipitation, solar radiation, and maximum and minimum temperatures were obtained from three meteorological stations (Alegria, Arkaute and Kapildui, located at elevations of 545, 517 and 1173 m, respectively). For the MOHID simulation, ten-minute interval data of precipitation, temperature, solar radiation, relative humidity and wind speed data from Alegria meteorological station were used. This information was acquired from the Basque Meteorology Agency (Euskalmet).

Digital elevation model (DEM)

The DEM is required by both models because each uses it for watershed delineation and stream network definition. In this study, the DEM LIDAR 2008 was used with a grid resolution of 5x5 m, produced by Spatial Data Infrastructure of the Basque Government (GeoEuskadi).

Soil map

A soil map developed by Iñiguez et al. (1980) was used, from which each soil class was characterized with an average texture according to data developed by the Corporation of the Basque Government for the Rural and Marine Environment (HAZI).

Land use map and agricultural practices

Agricultural management simulation was based on crop related information and a 2008 land use map provided by the Technology Corporation of the Basque Government (NEIKER-Tecnalia). The procedure consisted of indentifying agricultural and non-agricultural zones and then establishing crop rotations in such a way that primary crop extensions were maintained throughout the study. The crop rotations considered were the following (barley and oats were simulated as the same crop in the SWAT because of their similarities): Barley-Sugarbeet-Wheat; Oats-Sugarbeet-Wheat; Barley-Potato-Wheat; Oats-Potato-Wheat; and Barley-Wheat. Management practices considered in the models are defined in Table 4-1.

Crop	Cycle	Tillage (only in SWAT)	Fertilization	Fertilizer type	Fertilizer amount (Kg N ha ⁻¹)
Winter cereal	2 Nov – 31 Jul	25 Oct	25 Jan 5 Apr	15-15-15 Nac 27%	Barley/oat: 40-120, Wheat: 50-150
Spring cereal	5 Feb – 31 Jul	1 Feb	25 Feb 5 Apr	15-15-15 Nac 27%	Barley/oat: 40-120, Wheat: 50-150
Sugar beet	15 Feb – 1 Nov	10 Feb	10 Feb 5 May	8-15-15 Nac 27%	100 120
Potato	20 Apr – 20 Oct	15 Apr	15 Mar 20 May	7-10-20 Nac 27%	90 140

Table 4-1. Management practices considered in the models.

4.1.2.5. MODEL CALIBRATION AND PARAMETERIZATION

Data from several studies conducted in the same watershed have been used to perform the parameterization and calibration of each model. Essentially, for the calibration process, discharge and river nitrate concentration data were taken from Cerro (2013) and the monthly water table data from the Alava Provincial Council.

The SWAT model was manually calibrated after the performance of a sensitivity analysis by which most influential parameters were highlighted. This analysis was performed by the tool in ArcSWAT Interface, which combines the Latin Hypercube (LH) and One-factor-At-a-Time (OAT) sampling methods (Veith and Ghebremichael, 2009). The calibration procedure was relatively easy and the model performs quickly. The calibration is of great importance regarding the nutrient transformation related parameters, which due to the fact of being simulated in a conceptual way, their calibration is crucial. Thus, the parameters in the MOHID model had to be calibrated by the trial-and-error adjustment procedure, which is considered a very tedious and time consuming task (Madsen and Jacobsen, 2001), particularly when working with physics-based distributed models, when a high amount of possibilities are found and the computational cost is high. Thus, to ease this task, it is essential to identify the most uncertain or critical parameters at the beginning of the calibration process (Refsgaard, 1997; Feyen et al. 2000) and to decide which parameters are not subjected to calibration. In the following section the parameters that have been calibrated in the SWAT and MOHID models are discussed.

SWAT

Once the model has been spatially discretized, the soil properties and soil thickness has to be specified. An average texture was defined for each soil type and the necessary parameters (such as bulk density, available water content and saturated hydraulic conductivity) were obtained from the Soil Water Characteristics program developed by the USDA (Saxton and Rawls, 2009) (Table 4-2). By manual calibration, the most sensitive parameters (found by sensitivity analysis incorporated in SWAT) were adjusted, which were related to hydrological and nitrogen transport and transformation processes (Table 4-3).

	Layer n ^o	Layer depth (mm)	Clay (%)	BD (g cm ⁻³)	AWC (vol %)	Ks (m d ⁻¹)	OC (%)
ROccl	2	(1) 600; (2) 1000	29	1.35	17	0.17	(1) 0.85; (2) 0.44
ROCCrc	2	(1) 600; (2) 1000	29	1.35	17	0.17	(1) 0.85; (2) 0.44
CCcvc	2	(1) 600; (2) 1000	33	1.35	16	0.14	(1) 0.85; (2) 0.44
VCV	3	(1) 600; (2) 1000; (3) 1500	25	1.41	15	0.24	(1) 0.85; (2) 0.44; (3) 0
Ccrorc	2	(1) 600; (2) 1000	25	1.38	17	0.22	(1) 0.85; (2) 0.44
CCvc	2	(1) 600; (2) 1000	23	1.43	14	0.29	(1) 0.85; (2) 0.44
CV	2	(1) 600; (2) 1000	16	1.45	13	0.56	(1) 0.85; (2) 0.44
Lulro	2	(1) 600; (2) 1000	30	1.39	15	0.16	(1) 0.85; (2) 0.44

Table 4-2. Soil classes and main characteristics defined for SWAT. ROccl: Ochric Rendzina; ROCCrc: Ochric Rendzina with Calcic Cambisol; CCcvc, Ccrorc, CCvc: Calcic Cambisols; VCV: Vertisol with Vertic Cambisol (1 and 2, top and bottom layers, respectively); CCCV: Calcic Cambisol with Vertic Cambisol; CV: Vertic Cambisol; Lulro: Ortic Luvisol

Parameter	Input file	Description	Range	Calibrated value
EPCO	.bsn	Plant uptake compensation factor	0.01–1	1
ESCO	.bsn	Soil evaporation compensation factor	0.01–1	0.9
SURLAG	.bsn	Surface runoff lag coefficient	1–24	5
CDN	.bsn	Denitrification exponential rate coefficient	0–3	0.1
CMN	.bsn	Rate coefficient for the mineralization of the humus active organic nutrients	0.0001–0.003	0.002
RSDCO	.bsn	Rate coefficient for mineralization of the residue fresh organic nutrients	0–0.1	0.01
NPERCO	.bsn	Nitrogen percolation coefficient	0.01–1	0.8
SDNCO	.bsn	Denitrification threshold water content	0–1	1
ALPHA_BF	.gw	Baseflow alpha factor	0–1	0.35
GW_DELAY	.gw	Groundwater delay	0–500	0.5
GW_REVAP	.gw	Groundwater revap coefficient	0.02–0.2	0.02
REVAPMN	.gw	Threshold depth of water in the shallow aquifer for	0–8000	2000

		revap to occur		
GWQMN	.gw	Threshold depth of water in the shallow aquifer required for return flow to occur	0–5000	800
HLIFE_NGW	.gw	Half-life of the nitrate in shallow aquifer	0–5000	2500
CN2	.mgt	Curve number	0–100	±10% of initial values

Table 4-3. Main variables used for sensitivity and calibration in SWAT.

MOHID

One of the aspects that must first be defined is the system's lowest boundary (impermeable layer depth), which in combination with the topmost boundary (DTM) defines the porous media thickness. For the simulation, a thickness map was developed from the data presented by Arrate (1994). Then, it was necessary to establish the vertical discretization of the system and define the different material horizons. In this study, two horizons were distinguished. The first representing the soil (whose hydraulic parameters are defined in Table 4-4; Figure 4-2) and the second representing the aquifer (Table 4-5; Figure 4-2). Based on field data, the soil thickness was set to 1.2 m. As the flow in the porous media is modeled after the Richard equation, for each horizon the following parameters must be defined:

1. Saturated and residual soil moisture contents (Θ_s , Θ_r)
2. Saturated hydraulic conductivity (K_s)
3. Soil moisture retention and unsaturated hydraulic conductivity curves as summarized by the parameters α , n and l of van Genuchten (1980) and Mualem (1976).

These parameters were estimated using the pedotransfer functions (PTFs) included in the ROSETTA software (Schaap and Leij, 1998). For characterizing the aquifer, a general texture was attributed and a mean hydraulic conductivity was assigned to each transmissivity zone according to Arrate (1994) (Table 4-5, Figure 4-2). Θ_s was calibrated by adjusting the simulated discharge and water table level to the observed data. In addition, for better a fit between observed and simulated results, it was necessary to include tight areas of lower hydraulic conductivity in the aquifer map (ID 5 in Figure 4-2). The horizontal-vertical hydraulic conductivity ratio was set to 25:1 by calibration of the simulated results against the observed data. The channel morphology (channel height and, top and bottom widths) has to be defined for each Strahler order. For this study, the channel dimensions were taken from Cerro (2013), who presented detailed information about the channel profiles.

	Textural class	Θ_s	Θ_r	n	K_s (m d ⁻¹)	α (m ⁻¹)	ρ
Superficial horizon (0–1.2 m)	Silty Clay Loam	0.4820	0.0901	1.5202	0.12	0.84	1270
	Loam	0.3991	0.0609	1.47	0.12	1.11	
	Silty Loam	0.4387	0.0645	1.66	0.18	0.51	
	Clay Loam	0.4418	0.0792	1.4145	0.08	1.58	

Table 4-4. Soil properties defined for the MOHID model.

	Aquifer ID	Θ_s	Θ_r	n	K_s (m d ⁻¹)	α (m ⁻¹)	ρ
	1				23.76		
	2				21.17		
	3				23.33		
	4				22.46		
	5				0.11		
Bottom horizon (>1.2 m)	6	0.35	0.0901	1.52	27.65	0.84	1600
	7				9.5		
	8				2.25		
	9				4.15		
	10				4.15		
	11				10.37		

Table 4-5. Saturated hydraulic conductivity of the transmissivity zones defined in the MOHID model.

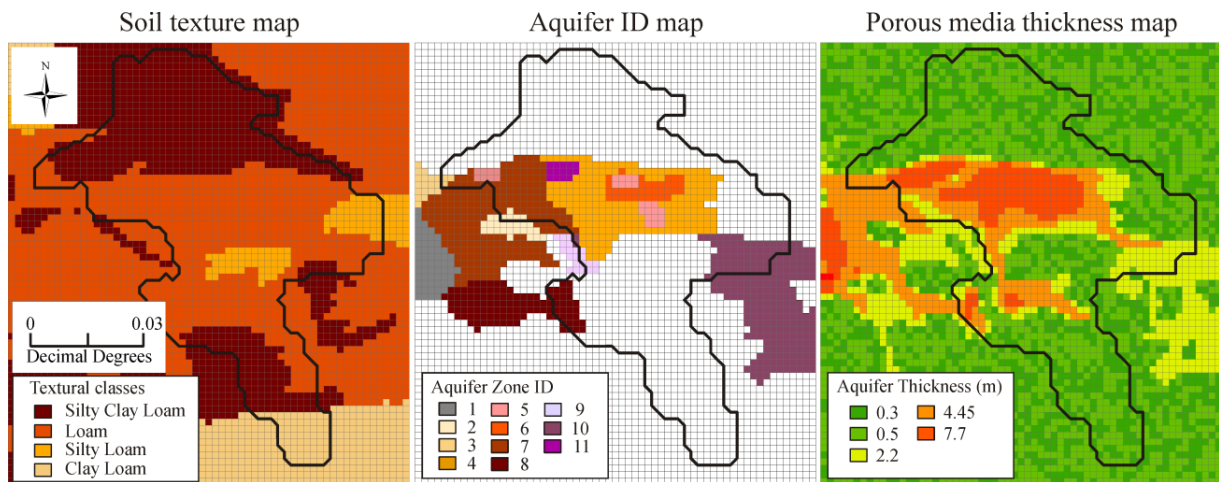


Figure 4-2. Soil texture, aquifer transmissivity zones and porous media thickness maps used in the MOHID model.

The river discharge, however, was found to be quite sensitive to the crop coefficient (K_c); therefore we believe that the adjustment of this parameter is of great importance. Because the K_c value changes according to the type and growing stage of the crop, and the crop rotations are simulated, to consider the spatio-temporal variation of this parameter it was necessary to define the K_c values in a HDF file, which stores varying values according to the spatial and temporal evolution of the crops. In line with the main crops in the watershed, the monthly K_c series were defined for cereals, potato and sugarbeet, based on growing stage values taken from FAO 56 (Allen et al. 2006) (Table 4-6). The K_c value for bare soil was also considered, as it is thought to be an important factor controlling the evaporation during intercrop periods (Orang et al. 2013). For the forest and past land uses values of 1 and 0.8 were fixed, respectively.

Regarding the nitrogen cycle parameters, both initial concentrations of Particulate Organic Carbon (POC), Dissolved Organic Carbon (DOC) and Nitrate (NO_3), and decay rates have to be defined (Table 4-7). Whereas the initial conditions were established according to field data based on different author's measurements, the decay constants were calibrated by trying to fit simulated results to the observed data.

	Bare Soil	Winter Cereal	Spring Cereal	Potato	Sugar Beet
January	1.3	0.9	-	-	-
February	0.7	1.0	0.7	-	-
March	0.5	1.1	0.63	-	0.35
April	0.3	1.15	0.91	-	0.63
May	0.4	0.87	1.15	0.5	0.91
June	0.3	0.6	1.15	0.8	1.2
July	0.3	0.3	0.78	1.15	1.2
August	0.3	-	0.4	1.15	1.2
September	0.4	-	-	0.95	0.95
October	0.4	-	-	0.75	0.7
November	0.7	0.7	-	-	-
December	0.8	0.8	-	-	-

Table 4-6. Crop coefficient values defined for the MOHID model.

Variable	Value	Description and source
ρ	1270–1600 (kg m ⁻³)	Dry bulk density (Muñoz, 2012)
ϕ	Defined for each soil type (cm ³ cm ⁻³)	Porosity (θ_s)
k_{POC}	0.0001 (d ⁻¹)	Decay rate for POC
k_{DOC}	0.00001(d ⁻¹)	Decay rate for DOC
k_{NO_3}	1 (mg N l ⁻¹)	Denitrification half saturation constant
[POC]'	9.5 (0–30 cm), 7.4 (30–60 cm) and 4.4 (60–90 cm); (g/kg)	Initial POC concentration (Muñoz, 2012)
[DOC]'	4.45 (mg l ⁻¹)	Initial POC concentration (Cerro, 2013)
[NO ₃]'	12 (mg l ⁻¹)	Initial NO ₃ concentration

Table 4-7. Water quality parameters and initial values used in the MOHID model.

4.1.2.6. ASSESSMENT OF MODEL PERFORMANCE

The simulation period was divided into the calibration and validation periods, whose lengths depended on the data availability. The daily flow calibration and validation periods were, respectively, from 21/10/09 to 31/12/10 and from 1/1/11 to 31/12/11. Indeed, the snowfall and consequent melting period (21/12/09 to 21/01/10) was not considered for the statistical evaluation because the MOHID model does not yet account for snow-related processes.

Water table calibration and validation were divided into periods 28/01/09 to 28/12/10 and 28/01/11 to 28/12/11, respectively. Finally, the nitrate load exportation calibration and validation periods ran from 28/10/09 to 31/08/10 and from 01/09/10 to 17/06/11, respectively.

In the SWAT and MOHID models a warm up period was discarded when assessing the results. Whereas in the case of the SWAT model, because the results were taken from a previous project (Epelde et al. 2015) that started in 1986, all of the results previous to 2009 were discarded; in the case of the MOHID model, the simulation started in 2008 and only had one year to warm up.

With the purpose of evaluating the models performance, both statistical and graphical techniques were used. The statistical indices calculated for the groundwater levels include the Percent Bias (PBIAS) and Coefficient of Determination (R²). To assess the model performance

with regard to the discharge and nitrate load predictions, Nash-Sutcliffe's efficiency coefficient (NSE), the Standard Deviation of Measured data (RSR), PBIAS and R² statistical criteria were used.

The **R²** describes the proportion of the variance in measured data explained by the model and ranges from 0 to 1, with higher values indicating less error variance, and typically values greater than 0.5 are considered acceptable (Santhi et al. 2001).

The **PBIAS** measures the average tendency of simulated data to be larger or smaller than the observed counterparts. Positive and negative values indicate model overestimation and underestimation bias, respectively. The performance is better for small magnitudes of PBIAS.

The **NSE** indicates how well the plot of the observed versus simulated values fits the line 1:1. It ranges from $-\infty$ to 1 and values near 1 indicate the best performance.

The **RSR** represents the ratio of the Root Mean Square Error (RMSE) and the standard deviation of observed data. Its value ranges from 0 to a large positive value, with 0 being the optimal value.

In this study, the NSE was considered satisfactory at >0.36 (Van Liew and Garbrecht, 2003), R² at >0.5 (Green et al. 2006) and PBIAS at $\pm 25\%$ for streamflow and $\pm 70\%$ for nitrate (Moriassi et al. 2007).

4.1.3. Results and discussion

4.1.3.1. HYDROLOGICAL PROCESSES

Evapotranspiration

Evapotranspiration (ET) is a process that highly influences the hydrology of a watershed as it constitutes one of the most important water outflows from the system. Because different methods were used to calculate the potential evapotranspiration (Hargreaves in the SWAT model and Penman-Monteith in the MOHID model), the simulated evapotranspiration was carefully studied and compared at the monthly scale as this has a big impact on the simulated hydrographs.

For the period 2009–2011, the SWAT and MOHID models simulated a mean evapotranspiration of 396 mm year⁻¹ and 390 mm year⁻¹, respectively, which accounts for 63% and 66% of the annual precipitation. Table 4-8 includes a summary of the water balance and the statistical data of the observed and simulated discharge.

	Observed	SWAT	MOHID
Precipitation (mm)	1251 ^a , 1148 ^b , 1439 ^c (575^a, 464^b, 619^c)	1336 (624)	1230 (574)
Total water yield (mm)	435	464 (218)	407 (194)
Max. discharge value (m ³ s ⁻¹)	9.55	8.57	8.34
Min. discharge value (m ³ s ⁻¹)	0.02	0.001	0.02
Mean discharge (m ³ s ⁻¹)	0.33	0.35	0.33
Potential evapotranspiration (mm)	-	1876 (924)	-
Actual evapotranspiration (mm)	-	806 (396)	787 (390)

Table 4-8. General water balance and discharge summary for the period 21/10/09 to 31/12/11. Values in bold correspond to the annual mean of the period 01/01/09 to 31/12/11 (a, b and c correspond to the Alegria, Arkaute and Kapildui meteorological stations, respectively).

Discharge

The performance of both models for simulating the discharge is considered to be satisfactory both at daily and monthly steps. In general, monthly results show better performance than daily steps, especially the MOHID model being the one which better simulates the observed data. Although the snow period was not considered for statistical analysis, it should be noted that after calibrating the snow related parameters in the SWAT model, the performance of discharge simulation was found to have significantly improved. As shown in Figure 4-3, both models underestimate and overestimate the flow peaks quite similarly, even the flow recessions seem to be better reproduced by the MOHID model.

During the calibration period, the mean discharge at the Alegria River watershed outlet was of 0.39 m³ s⁻¹, with 9.55 and 0.02 m³ s⁻¹ maximum and minimum registered values, respectively.

The SWAT model simulated for the same period an average discharge of 0.43 m³ s⁻¹, whereas the simulated discharge with the MOHID model was 0.43 m³ s⁻¹. Both models exhibit a general trend of overestimating the discharge over the calibration period, not considering the summer season, when observed values are higher than simulated ones, which is something that could be related to an underestimation of the ET during those months.

Figure 4-4 shows the relative water volume exportation simulated at the monthly basis with the SWAT and MOHID models. This corresponds to the difference between the simulated monthly water yield with regard to the observed data. As shown, both models reflect the same tendency, with the SWAT model exhibiting more accentuated differences.

Water table level

Because MOHID is a physics-based model it solves the continuity equation in each of the cells defining the system, which means that the model calculates the water content at every cell and thus, it is able to calculate the water table level at any location. Conversely, SWAT is a semi-distributed and conceptual model that is capable of reproducing the water table fluctuation only if it has been considered during the calibration process. In this study, this option was discarded when a considerable decline of the model performance was observed in terms of the discharge and nutrient load exportation when the water table level was calibrated.

Figure 4-5 shows the water table levels simulated by the MOHID model for each of the seven well locations (Figure 4-1). In some cases (wells 14 and 15) it was difficult to obtain a good fit between the observed and simulated values, something that could be linked to errors in the real system representation, e.g., the porous media thickness. Although during the calibration process some tests were performed to fix these specific sites differences, better results were not obtained. Indeed, the differences between observed and simulated results at these locations could also be linked to errors in observed data or site specific hydrological behavior which is not representative of the general water table trend.

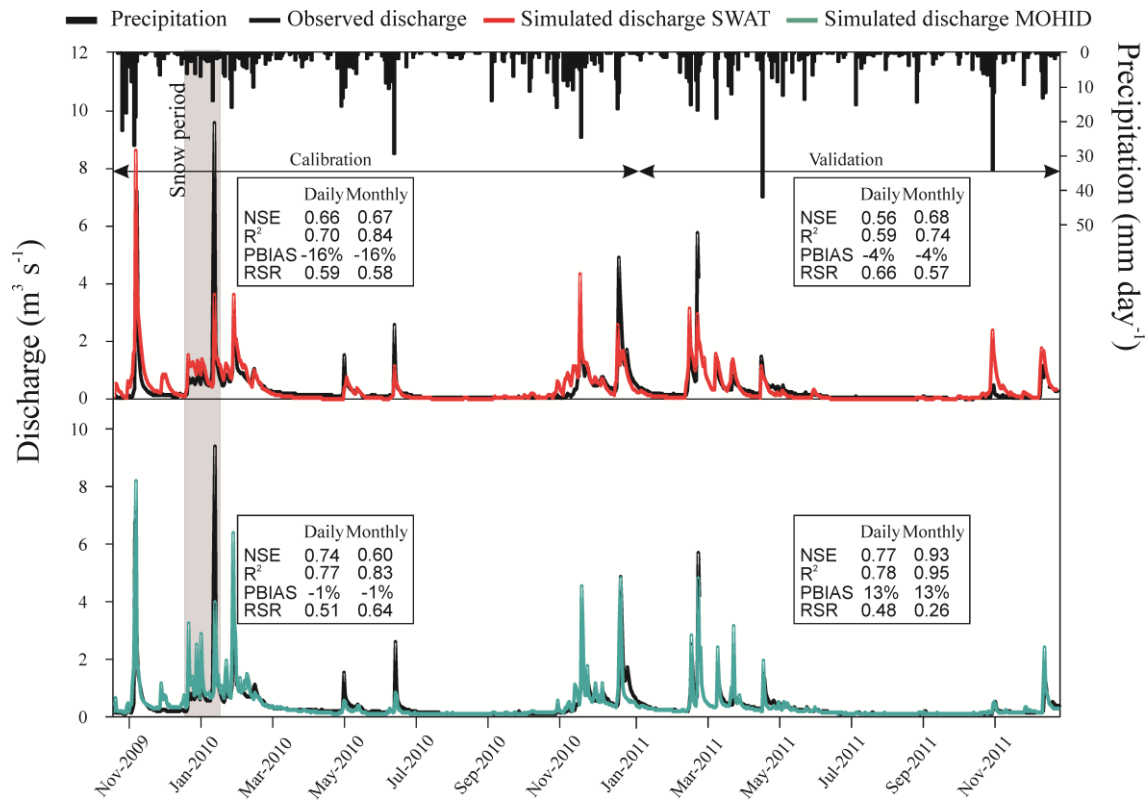


Figure 4-3. Observed and simulated discharges at the Alegria River watershed outlet (SWAT (top) and MOHID (bottom) simulations are represented in red and green, respectively).

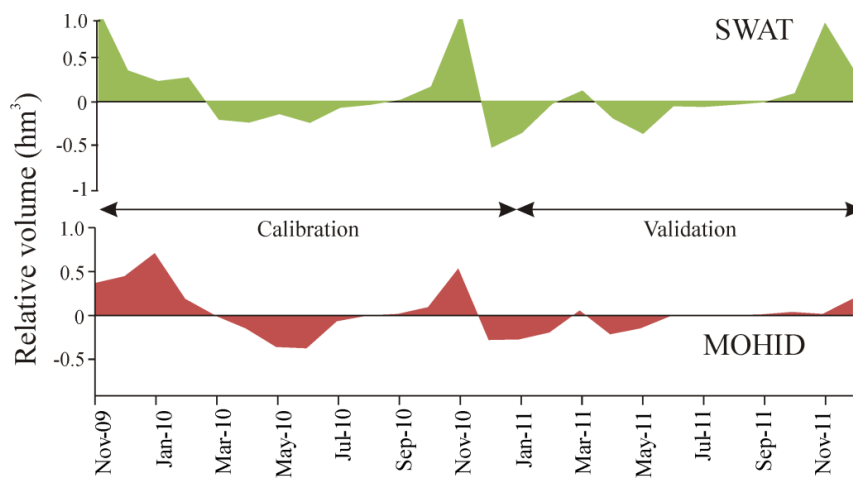


Figure 4-4. Relative water yield simulated by the SWAT and MOHID models.

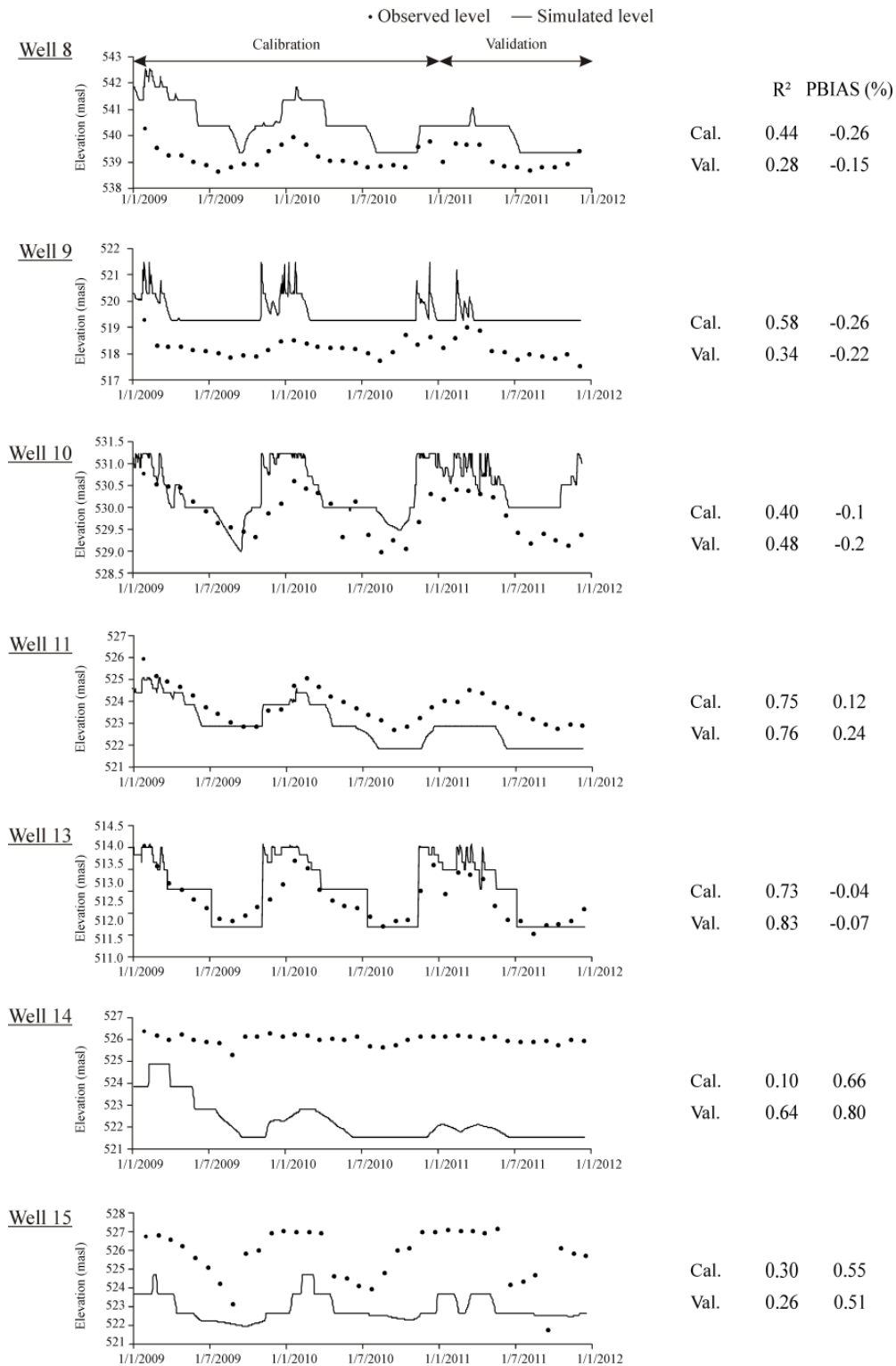


Figure 4-5. Observed and MOHID simulated water table levels on different wells.

In any case, the rest of the simulated water table levels show a good agreement with the observed data, with wells 11 and 13 being especially promising ($R^2 > 0.7$ and $PBIAS < 0.25$). Furthermore, in the same figure the effect of the model's vertical discretization on the simulated results can be observed, which coincides with vertical layers' thickness. This is related to the consideration of the saturated conditions by the model. Actually, the water table level is simulated depending on the water content calculated for field capacity conditions and the water

content threshold established by the user for the cell that is considered saturated (in the current study it was set to 99.5%). The effect the vertical discretization has on results is something which there is little information about, because studies usually only focus on the effects of the horizontal discretization above the simulated results (Styczen et al. 1999; Lin et al. 2010).

4.1.3.2 NUTRIENT TRANSPORT AND TRANSFORMATION PROCESSES

Nitrogen cycle

Quantifying the processes affecting the N cycle is of great importance when working with water quality watershed scale models, as they directly influence the variables usually being studied, such as the nutrient load exportation (kg or t) or concentration (mg l^{-1}). In this study, concretely, the SWAT simulated mineralization amount is used as an input for the MOHID model, inputs and outputs considered in the SWAT model being the following ones:

According to the SWAT model, in the period 01/01/09 to 31/12/11, **fertilization** and **mineralization** represented 60 and 37% of the total N input (quantified as 122 and 76 $\text{Kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, respectively). **Atmospheric deposition** accounted for 6 $\text{Kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, representing 3% of the total N input. It has to be considered that whereas fertilization and atmospheric deposition are inputs established by the user, the mineralization process is simulated by the model. N output was primarily a result of **plant uptake**, representing 85% of the total N output (quantified as 147 $\text{Kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$). Other N outputs, such as **denitrification** and **stream losses**, comprised 8 and 7% of the total N output (quantified as 14 and 12 $\text{Kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, respectively), the stream losses representing 6% of the total input. For the three year period the mean annual input and output are quantified at 204 and 173 $\text{Kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, respectively. As the MOHID model does not calculate a global mass balance, the quantification of the simulated processes (at the moment only denitrification) is discussed in section 3.3 *Natural Attenuation*.

Nitrate load exportation

The daily load was satisfactorily simulated by both models during the calibration (28/10/09 to 31/08/10) and validation (01/09/10 to 17/06/11) periods (Figure 4-6), with MOHID exhibiting better performance at both the daily and monthly steps. The observed data indicated that during the calibration and validation periods 50 and 86 t were exported from the watershed, whereas the MOHID and SWAT simulated 54 and 76 t, and 46 and 48 t, respectively. Therefore, although during the calibration period both models predicted a similar N exportation, the SWAT model appears to underestimate the exportation during the validation period.

The monthly distribution of the exported N load (Figure 4-7) indicates that, generally, the MOHID simulated monthly load is higher than the SWAT simulated load for nearly every month during both calibration and validation periods. Nevertheless, the N load overestimation during some months and underestimation during other months can be attributed to the water yield overestimation and underestimation, a fact that evidences the dependency of the simulated N load to the streamflow simulation.

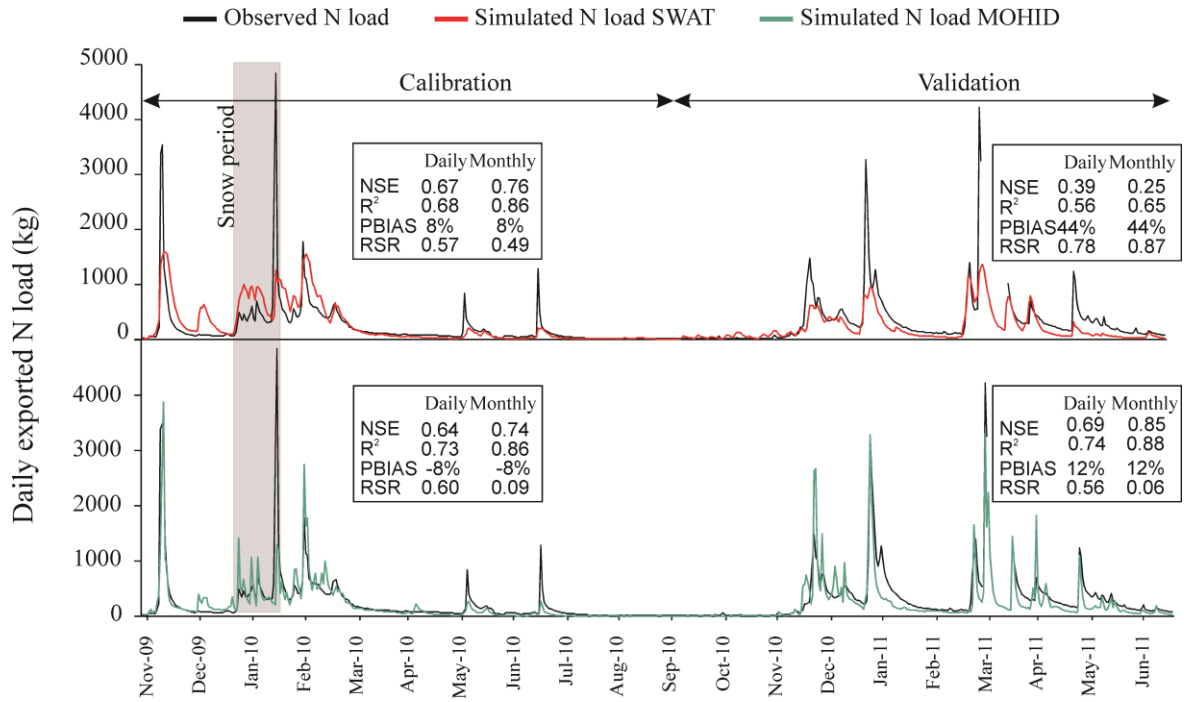


Figure 4-6. Observed and simulated nitrogen daily load exportation at the Alegria River watershed outlet (SWAT and MOHID simulations are represented in red and green, respectively).

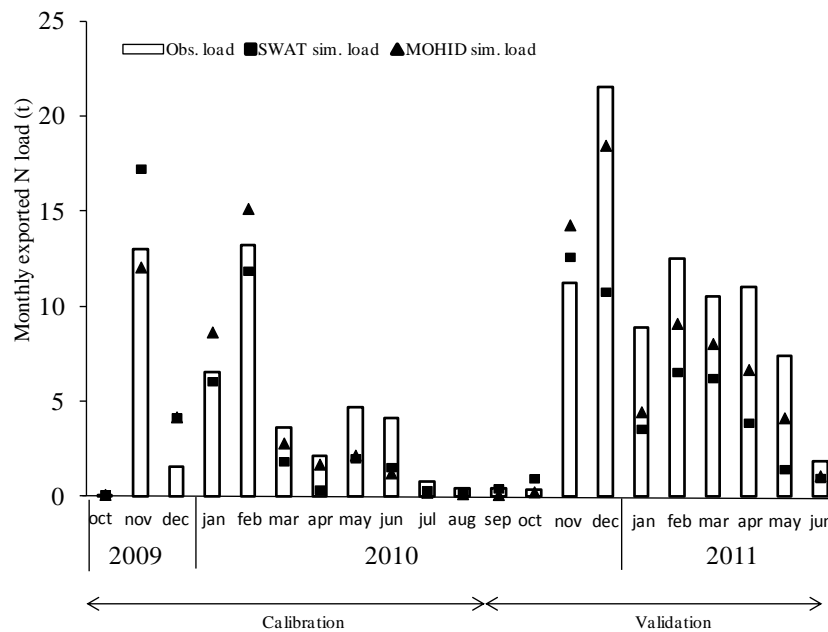


Figure 4-7. Observed and simulated monthly load exportation at the Alegria River watershed outlet (SWAT and MOHID simulations are represented with squares and triangles, respectively).

Nitrate concentration in the stream

Figure 4-8 shows the observed and simulated daily nitrate (N-NO₃) concentration in the Alegria River. In terms of the average concentration for the entire period, the SWAT and

MOHID models simulate mean values of 5.1 and 6.1 mg N l⁻¹, respectively, whereas the observed mean concentration is 6.8 mg N l⁻¹. Although the SWAT simulated concentration appears to vary less than the MOHID simulated concentration, the MOHID model reveals a higher R² than the SWAT model with regard to observed data (MOHID: 0.36 and SWAT: 0.12) (Figure 4-9).

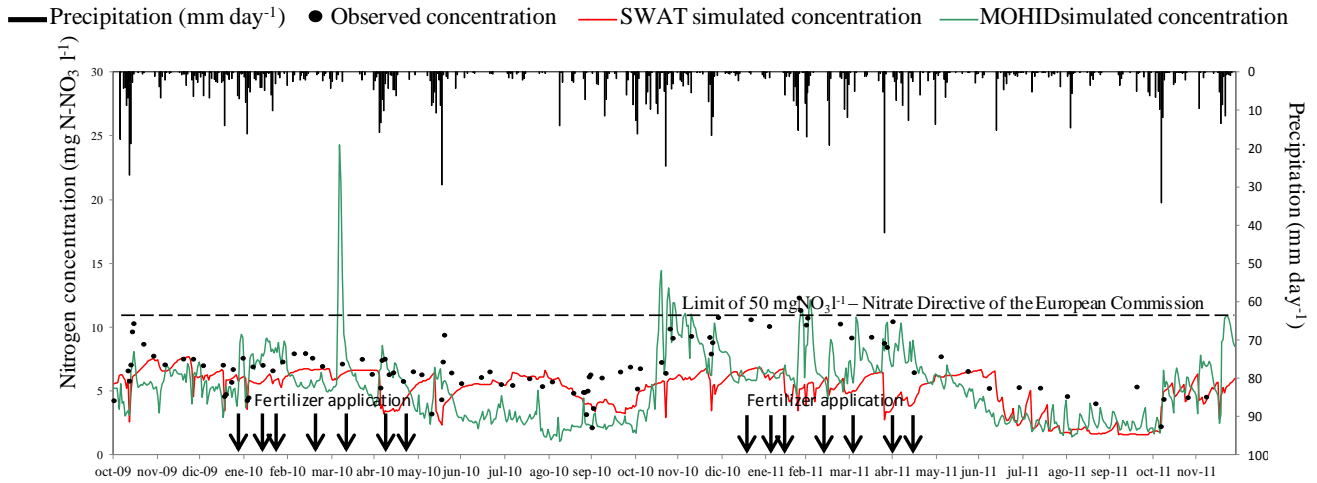


Figure 4-8. Observed (black dots), SWAT (red line) and MOHID (green line) simulated nitrogen concentrations in Alegria River. Fertilization application dates are indicated with black arrows.

The dispersion graph shown in Figure 4-9 shows that the MOHID simulated concentration fits the 1:1 line better, signifying that both the low and high values are well represented by the model, therefore, demonstrating overall the MOHID model better represents the nitrogen concentration variability in the river.

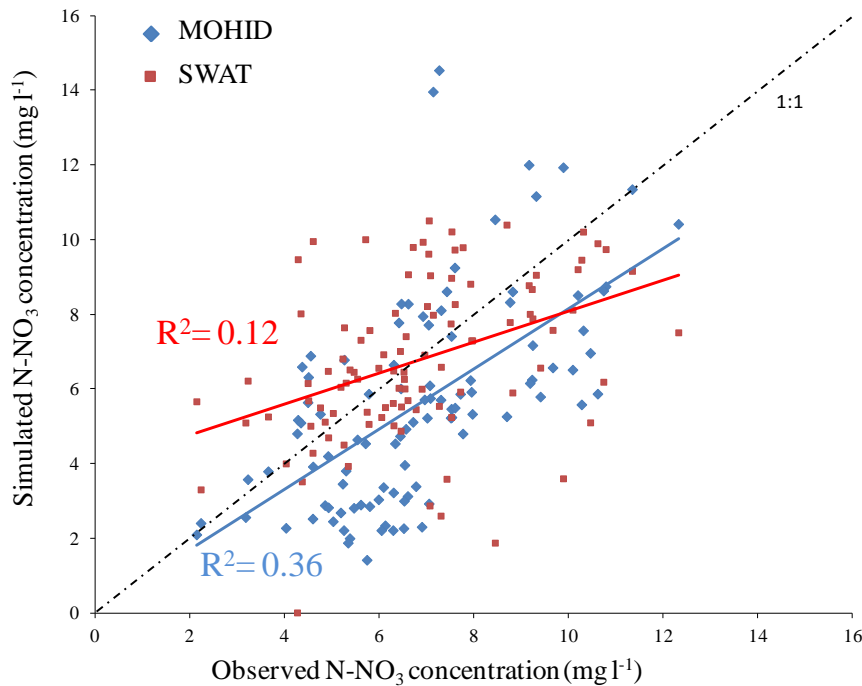


Figure 4-9. Relationships between observed and simulated (SWAT in red; MOHID in blue) river nitrogen concentrations (mg N-NO₃ l⁻¹) during the period 28/10/09 to 07/12/11.

Nitrate concentration in the aquifer

Although the SWAT does not simulate the aquifer nitrate concentration explicitly because of the semi-distributed structure of the model, it was found that when the model is calibrated focused on this variable, as occurs for the water table simulation, the nitrate concentration of the groundwater contribution satisfactorily represented the observed nitrogen concentration of the groundwater (Epelde et al. 2015). In this work, however, the effort was directed towards the denitrification simulation and, therefore, the parameters changed with respect to the cited reference resulting in a decline in the contributed concentration, especially during the summer seasons (Figure 4-10).

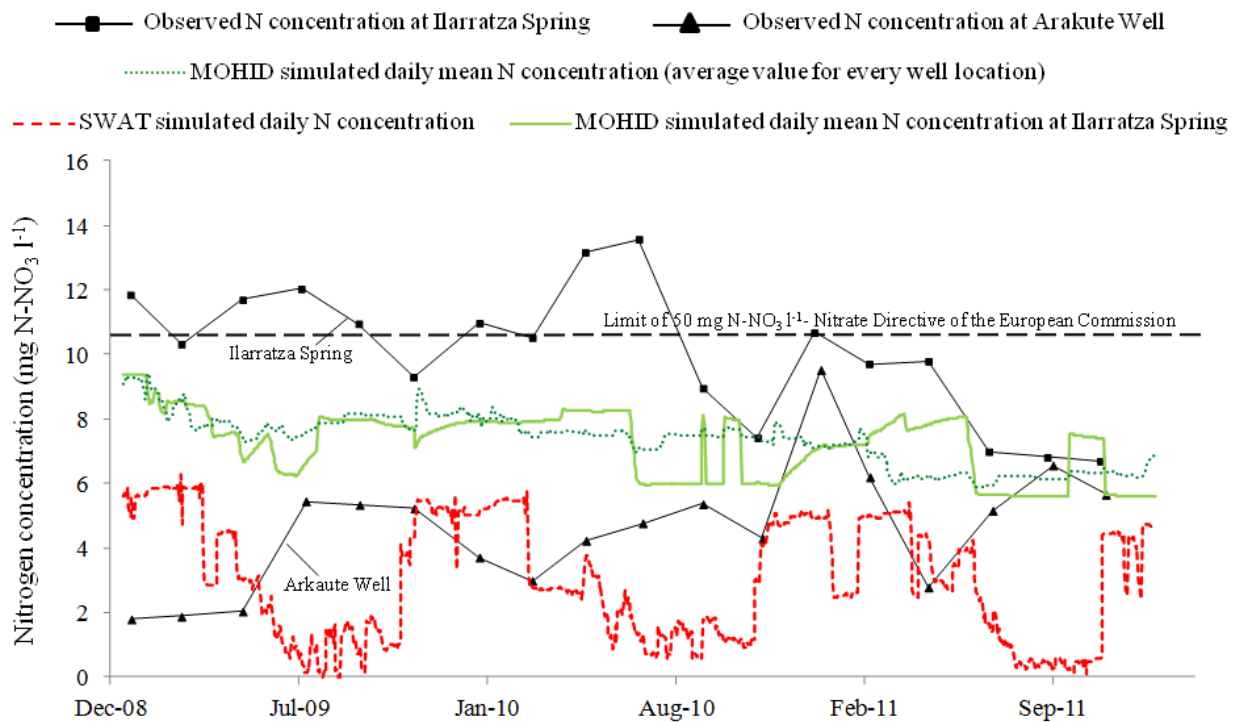


Figure 4-10. Observed, SWAT and MOHID simulated nitrogen concentration (mg N-NO₃ l⁻¹) in the groundwater.

Figure 4-10 also shows the observed N concentration in the reference sites Ilarratza and Arkaute (Figure 4-1), the data obtained from the Basque Water Agency webpage (www.telur.es), the daily MOHID simulated N-NO₃ concentration at the Ilarratza location and the mean N-NO₃ concentration obtained from all of the wells represented in Figure 4-1. The groundwater concentration simulated at Ilarratza is approximate to the observed data at the same location; calculated SWAT mean is within the range defined by the available field data.

Nevertheless, the fluctuation in the simulated concentration at Ilarratza (maximum and minimum values of 9 and 6 mg N-NO₃ l⁻¹, respectively) is much lower than the variation registered at Ilarratza and Arkaute (maximum and minimum values at Ilarratza are 14 and 7 mg N-NO₃ l⁻¹, respectively; maximum and minimum values at Arkaute are 10 and 2 mg N-NO₃ l⁻¹, respectively). The low fluctuation of the MOHID simulated groundwater concentration can be linked to the fact that only the saturated cells of the model are considered, which depends on the configuration of the model, and, therefore, this model output does not consider the higher

nitrogen concentration of the shallower cells. This concentration variation is represented in Figure 4-11, which shows the mean, maximum and minimum concentration values on the vertical distribution of the model.

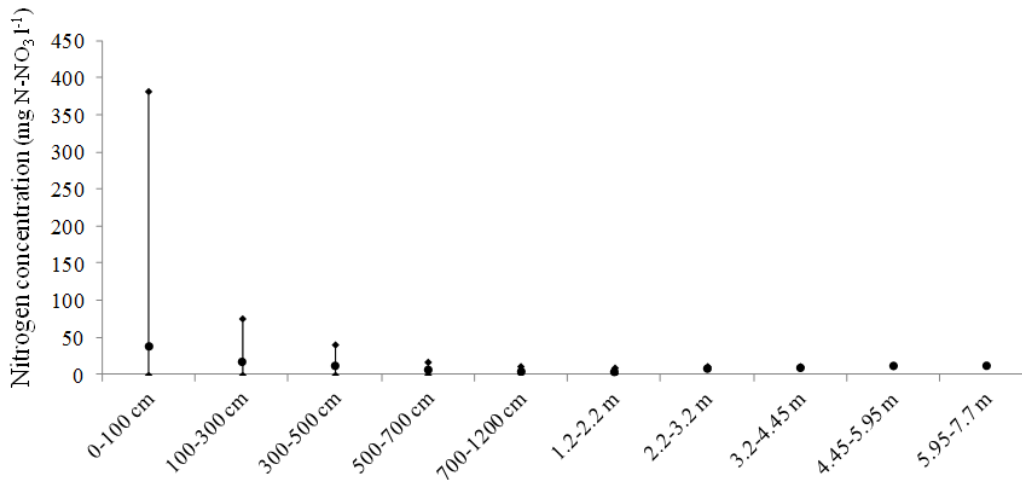


Figure 4-11. MOHID simulated mean, maximum and minimum nitrogen concentration (mg N-NO₃ l⁻¹) for different depths of the model considering all of the well locations shown in Figure 4-1.

The higher concentration variability in the top cells (up to 1.2 m depth) is attributed to the increase caused by the fertilization input and plant's N uptake, a process that results in the depletion of N in those layers during some periods. In contrast, in the deeper cells there is no concentration variability because the fertilization input is not as quick as that in the upper cells, and the plants only uptake N up to the depth of their roots, which does not cause the N depletion found in the upper layers.

4.1.3.2. NATURAL ATTENUATION

The natural attenuation of nitrogen pollution is considered of great importance concretely in agricultural areas where management practices have led to water pollution and vulnerable zones declaration, as it is the current study area. It occurs when the denitrification process is held by microorganisms in anaerobic conditions, if enough carbon and nitrogen are found in the medium. This process can happen in aquifers, soils and riparian zones, but because of the higher nutrient content in top layers of the soils the process is much more important in this ecosystem and therefore, much more studied in the literature (Sánchez-Pérez et al. 2003b; Rassam et al. 2008).

The fact that the SWAT and MOHID models have different formulations for the denitrification process simulation as well as the water movement simulation results in both models differing in the quantity and spatial distribution of the simulated denitrification process.

Although the verification of this type of data is very difficult and has more uncertainty, field measurements were not conducted in this study to assess the model's performance; therefore, values obtained by other authors in the same study area were used. According to Ortuzar (2007), N losses by denitrification were quantified to be around 10–14 kg N ha⁻¹ year⁻¹, whereas the value obtained by Merino et al. (2012) quantified the process to be around 6 kg N

$\text{ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$. Because the process is highly dependent on meteorological and agricultural conditions, it is thought to be variable in time and space. However, without more distributed measurements, the values obtained in the agricultural plots are used to represent the studied watershed. Therefore, the SWAT (Figure 4-12) and MOHID (Figure 4-13) simulated values of $13\text{--}15 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$ and $9\text{--}10 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, respectively, are considered satisfactory values as they are within acceptable ranges. Nevertheless, what really differs between the models is the spatial distribution of the process itself.

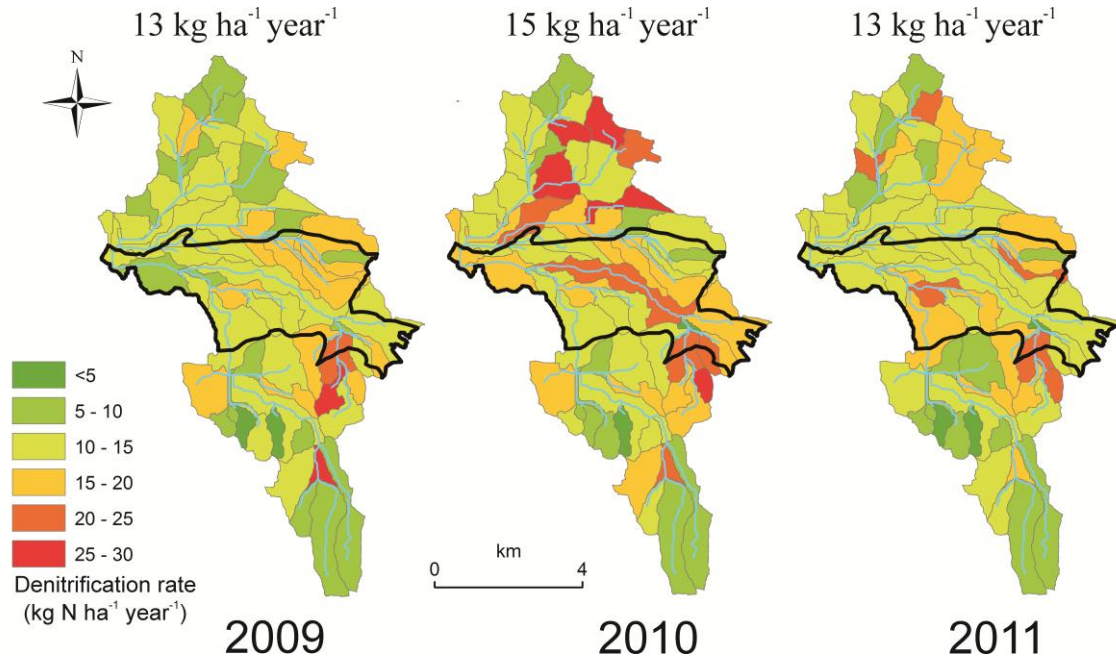


Figure 4-12. HRU weighted sub-basin denitrification rates simulated by SWAT.

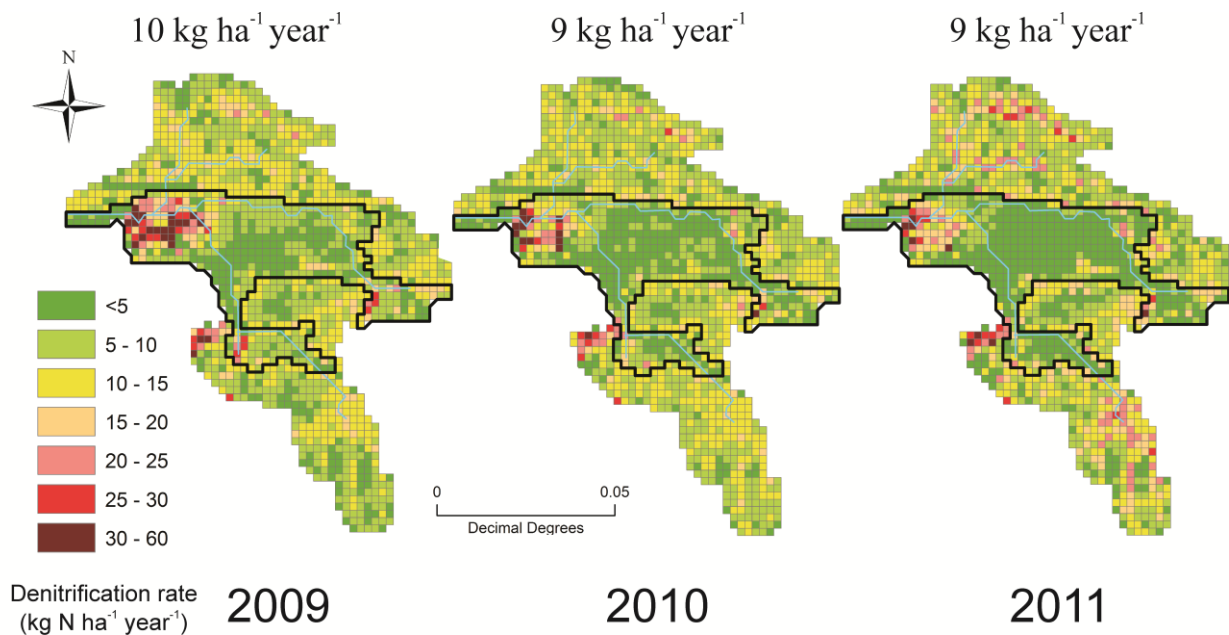


Figure 4-13. Denitrification rates simulated by MOHID.

Denitrification in the SWAT model varied according to precipitation and agricultural practices (namely fertilization and irrigation), which results in a uniform distribution of denitrification rates throughout the watershed, without accumulating in specific areas and without being affected by differences in soil thickness.

Conversely, the MOHID model simulates the highest denitrification rates in areas where the relative water content is high, areas that are associated with the discharge zone and areas where the porous media thickness is minor (Figure 4-13). Considering agricultural land use and, thus, agricultural practices are uniformly spread throughout the studied area, the spatial distribution of the MOHID model's simulated denitrification could be explained by the fact that in the central part of the watershed the infiltrated water has the potential to move down into deeper layers where the organic carbon content is lower, resulting in smaller denitrification rates. When water flows towards the discharge zone, the water table is shallower, resulting in denitrification in the top layers from the high carbon content.

To better understand the simulation of the denitrification process according to the SWAT and MOHID models and its relationship with the precipitation regime, two points (HRUs in SWAT and the equivalent cells in MOHID) located in the central part of the watershed and in the discharge zone were studied (Figure 4-14). Whereas the mean precipitation of three meteorological stations is presented for the SWAT results, for the MOHID results the precipitation corresponds to the Alegria station.

In both locations the SWAT simulates a similar denitrification pattern (Figure 4-14; a), which is the process prominent during the rainy season, especially after the first rains when the soils are saturated and the nitrate content is high. Thus, denitrification peaks, reaching a maximum value of $1.4 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ d}^{-1}$, which coincides with the maximum rates for precipitation, and the irrigation practice notably increases the denitrified N amount. Although at the watershed scale the denitrification process changes slightly from one year to the next, at the HRU scale the change is similar if non-irrigated HRUs are considered. In the case of irrigated HRUs, according to the SWAT model, the denitrification process can increase up to 258% compared to a non-irrigated HRU. On the one hand, for the HRU located at the center of the watershed, during the years 2009, 2010 and 2011, the denitrification amount was 12, 12 and $38 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, respectively. On the other hand, for the HRU located at the discharge zone, the annual denitrification amount was 11, 13 and $43 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$. Nevertheless, denitrification and water input (precipitation plus irrigation) in different locations show a similar relationship (R^2 is 0.17 and 0.15 in the HRU at the center of the watershed and at the discharge zone, respectively).

In the case of the MOHID simulated denitrification (Figure 4-14; b), there is a clear difference regarding the location of the examined cell. Although in both locations denitrification increases when precipitation occurs (reaching maximum values of 0.19 and $0.16 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ d}^{-1}$ at the discharge zone and at the central part of the watershed, respectively), the water table level is deeper at the center of the watershed, which results in heavier rains being needed to saturate the shallow cells where there is a sufficient concentration of carbon and nitrogen. Conversely, at the discharge zone, the water table is shallow and denitrification occurs in the topmost cells where the carbon and nitrogen concentration is higher, resulting in higher N losses by

denitrification. This difference in the origin of the denitrification process involves obtaining significantly different denitrified amounts with regard to the location. Therefore, in areas that are not close to the discharge zone the annual variation is essentially negligible (during the years 2009, 2010 and 2011 the denitrification at the center of the watershed was 4, 3 and 4 kg N ha⁻¹ year⁻¹, respectively), and near the discharge zone the denitrified amount can vary markedly according to the amount of water discharged (during the years 2009, 2010 and 2011 the denitrification at the discharge zone was 32, 21 and 18 kg N ha⁻¹ year⁻¹, respectively). The difference in the origin of the denitrification process can also be distinguished by the relationship between denitrification and precipitation. In the case of the cell located at the center of the watershed the R² value is 0.22, and for the cell located at the discharge zone R² is 0.06, which is evidence of the low response of denitrification to precipitation in this area.

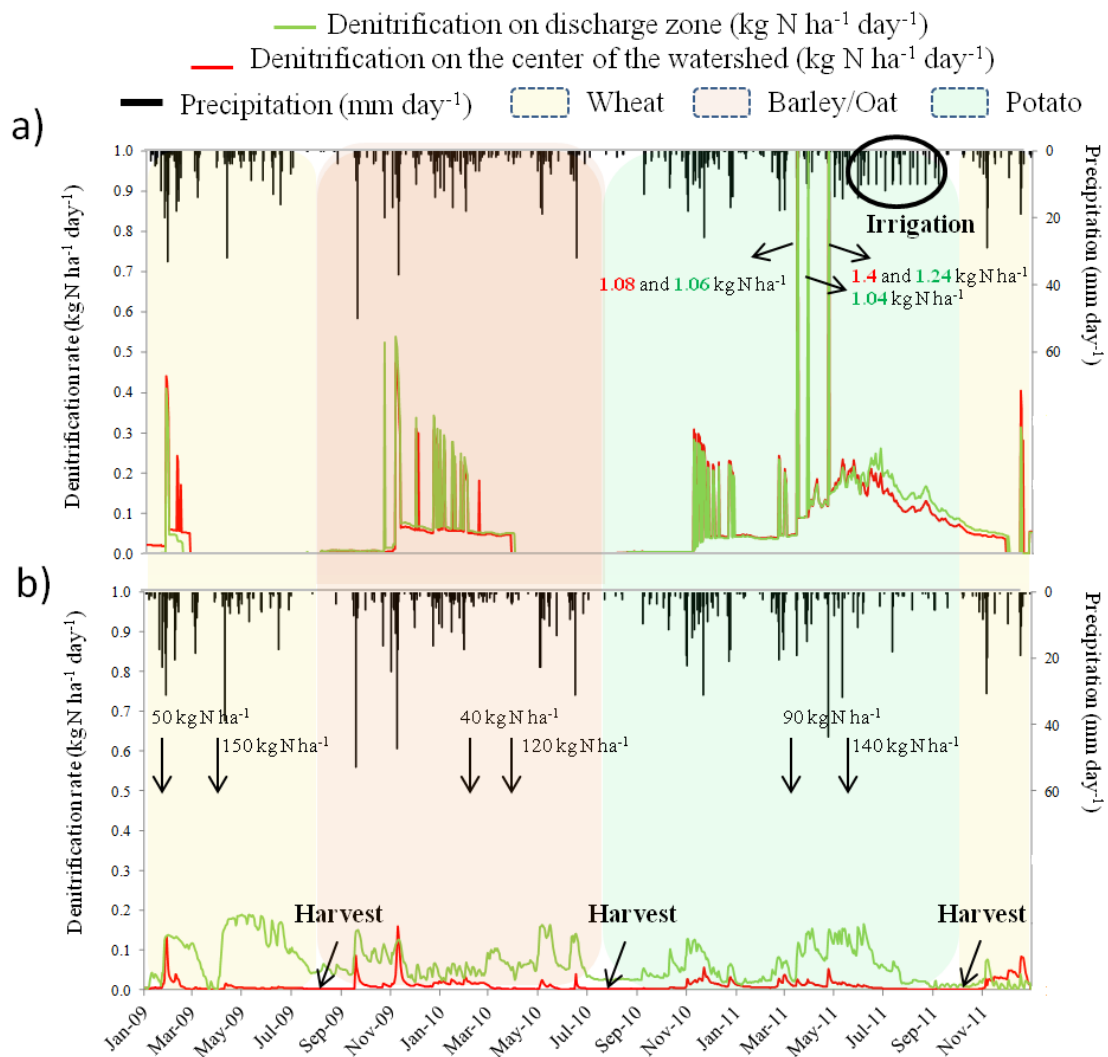


Figure 4-14. Precipitation considered by each model (mm day⁻¹) and simulated denitrification of the SWAT (a) and MOHID (b) models (kg N ha⁻¹ day⁻¹) at two different model sites (discharge zone in green and center of the watershed in red).

Although at the watershed scale the denitrification process simulation is considered satisfactory by both models, considering the maximum denitrification rates measured in the same study area under wheat and rapeseed crops, 0.15 (Ortuzar, 2007) and 0.14 kg N ha⁻¹ d⁻¹

(Merino et al. 2012), respectively, the MOHID model performs better at simulating the spatial distribution of the process.

Since the denitrification process is restricted to the anoxic zone, the simulation of the groundwater table location is thought to be of great importance for studying this process (Rassam et al. 2008). Therefore, this study shows that the MOHID model is more suitable than the SWAT model for identifying the denitrification zones due to its ability to reproduce the water table level.

4.1.3.4 UNCERTAINTY OF RESULTS

To understand the obtained results, identifying the uncertainty sources associated with each model is of crucial importance. In the present study the following model components, which can be classified into four groups according to Liu and Gupta (2007), were identified to potentially increase the uncertainty of the models, highlighting the differences between observed and simulated values:

- Uncertainty related to *Model structure* can be attributed to (i) simplifications of the models (i.e., divided water storage reservoirs, a lack of flow from the rivers into the aquifer, an inappropriate consideration of the carbon degradation in SWAT, consideration of the top layer for an aquifer-river flow and a lack of connection between crop residue and the POC pool in MOHID); and (ii) numerical approximations in the code (i.e., the influence of layer thickness on the water table discretization in MOHID and the influence of the daily time steps on the SWAT results).
- Uncertainty related to *Parameterization* is derived from the definition of (i) system boundaries (in both models the watershed boundary was considered to follow topography); (ii) cell size (i.e., DTM cell size is responsible for watershed boundaries and river network delineation in SWAT and MOHID, and the layer thickness directly influences the water table simulation in MOHID); (iii) input data (i.e., interpolation of rain in SWAT, consideration of a unique station in MOHID, mineralization input in MOHID, and the fertilization amount in both models); (iv) parameters: the subjectivity for selecting parameters (i.e., hydraulic properties, soil and system depth, land use, channel morphology and carbon distribution) and the lack of temporal variability of the parameters (i.e., curve number in SWAT, Manning in MOHID, and crop cycle duration without weather consideration).
- Uncertainty related to *Initial Conditions* is primarily attributable to (i) the nitrate concentration; and (ii) the carbon concentration.
- Uncertainty related to *Observed Data* may be linked to (i) precision of field tools and laboratory work, and interpretation of the field data; (ii) the use of a Rating Curve for discharge conversion from the measured water column (in the case of streamflow simulation); and (iii) the use of the LOADEST program for nutrient load conversion from measured concentration values (in the case of nitrogen load simulation).

All of the aspects mentioned above can impact to a greater or lesser extent the uncertainty of the model results and, therefore, they must be considered when the simulated results are interpreted. Furthermore, the influence of subjectivity on the uncertainty involved in

a model must be considered. It has to be accepted that not everyone will make or define the same values for the given parameters. This will result in the definition of different data sets during the calibration process, which will possibly lead to similar results as other data sets. This problem was referred to as the concept of equifinality by Beven (1993), who apart from the *parameter set* also identified the equifinality related to the *model structure*. In fact, parameterization is believed to be the primary source of uncertainty for the SWAT and MOHID models. Nevertheless, the parameter values established for each model satisfactorily reproduce the observed data, which is indicative of the suitable representation of those values at the watershed scale.

4.1.4. Conclusions

This paper reflects the differences and complexity of two different methodologies for simulating the hydrological and nutrient transport and transformation processes at the watershed scale. Although the SWAT conceptual model has a simple setup and because of its fast execution the calibration process can be easily performed, MOHID, which is a fully distributed model, requires high computational time, causing its calibration to be much more laborious and time consuming. Nevertheless, although the performance of both models is considered satisfactory, the results show that the MOHID simulation is more accurate than the SWAT in terms of predicting discharge, N load exportation and N concentration at the Alegria watershed outlet and aquifer. Indeed, in three of the seven wells, the water table level was reproduced precisely by the MOHID model, and for two of the wells a general trend was simulated. In turn, the fact that the hydrological properties had to be calibrated in a distributed and physics-based model, something that should not be necessary according to many authors (Feyen et al. 2000; Sahoo et al. 2006), led to the conclusion that the heterogeneity in the medium makes the calibration of certain parameters indispensable, at least when the available field data are punctual and not representative for larger areas (Beven, 2000).

Whereas both models represented the actual agricultural management similarly, which is thought to be responsible for the N concentration and N load exportation in the river, the N cycle processes were considered quite differently by each model. The denitrification simulation results show that different conceptualization techniques result in the simulation of different N loss dynamics. Whereas the SWAT model simulates the denitrification losses quite uniformly, distributing them across the watershed with high denitrification peaks according to precipitation events and high denitrification rates when irrigation practices are applied, the MOHID model simulates the denitrification process directly, linking it to the hydraulic conditions of both the cells and the watershed. Indeed, having a similar watershed scale annual denitrification amount, the MOHID model more accurately simulates the denitrification peaks observed by other authors in the same study area, evidencing the suitability of Peyrard et al. (2011) equation for modeling the nitrate attenuation.

Accordingly, models that are able to satisfactorily simulate given processes (as observed throughout this paper, where each model is more appropriate to study a certain problem depending on the focus of the research) can be really useful tools not only for hydrological planning but also agricultural management assistance in watersheds where agricultural pollution has degraded water quality.

Acknowledgments The authors thank the Government of the Basque Country (for the grant given by the Department of Environment and Regional Planning; Consolidated Research Group IT598/13) and the University of the Basque Country (UFI 11/26) for their support. This work was performed with data obtained in the EU Interreg SUDOE IVB program (SOE1/P2/F146 AguaFlash project, <http://www.aguaflash-sudoe.eu>) and was funded by ERDF and the Midi-Pyrénées Region. This work was performed as part of the EU Interreg SUDOE IVB program (ATTENAGUA – SOE3/P2/F558 project; www.attenagua-sudoe.eu) and funded by ERDF.

4.2. RESULTADOS COMPLEMENTARIOS DEL MODELO MOHID Y DISCUSIÓN

4.2.1. Simulación de la superficie piezométrica

Tal y como se muestra en el apartado 4.2.3.1. *Hydrological processes* los niveles piezométricos han sido simulados, por lo general, de forma satisfactoria. No obstante, hay que tener en cuenta que los datos mostrados en ese apartado son datos puntuales y que, para la verificación general de la piezometría simulada, es aconsejable recurrir a los mapas (archivos HDF) de carga hidráulica generados por el modelo.

Debido a que el modelo simula un valor en cada celda que compone la malla, incluso en las zonas que quedan fuera de la delimitación del acuífero donde los suelos son de poco espesor (0.3-0.5 m), para una representación coherente de la piezometría del acuífero, es necesario escoger una capa representativa del mismo. En este caso, se ha escogido la capa 9 (Figura 2-19 del apartado 2.4.3.2. *Caracterización del medio poroso*) por ser la capa más superficial correspondiente al acuífero cuaternario.

Como se puede observar en las Figuras 4-15 y 4-16, tanto en aguas altas como en época de estiaje, la dirección general del flujo es de este a oeste, tal y como observó Arrate (1994) durante su Tesis Doctoral y fue, posteriormente, recogido en el Mapa Hidrogeológico del País Vasco (EVE, 1996). Como desde entonces no ha habido cambios significativos en la piezometría del acuífero puede decirse que las superficies piezométricas simuladas representan de forma coherente el flujo de las aguas subterráneas.

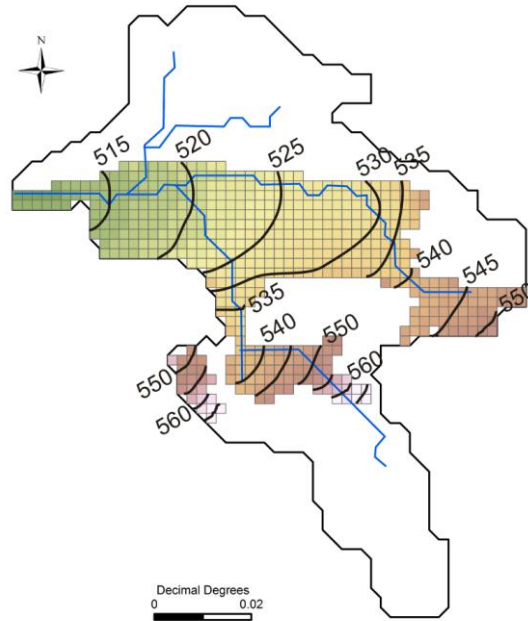


Figura 4-15. Mapa de isopiezas del Acuífero Cuaternario en condiciones de aguas altas (2009-01-28).

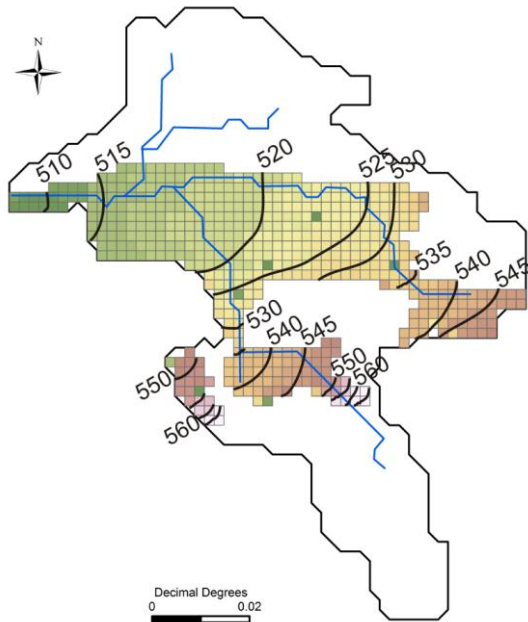


Figura 4-16. Mapa de isopiezas del Acuífero Cuaternario en condiciones de aguas bajas (2009-09-19).

4.2.2. Simulación de la producción de los cultivos

A pesar de que la simulación del crecimiento de la vegetación del código MOHID esté basada en la formulación del código SWAT, las diferencias que existen entre: (i) las variables que repercuten sobre el propio crecimiento (por ejemplo, la distribución del contenido hídrico); (ii) la estructura de cada código (por ejemplo, el hecho de que SWAT compense mediante parámetros la distribución vertical de la absorción de agua y nutrientes); y, (iii) las opciones que tiene el código MOHID para simular los procesos (por ejemplo, la formulación de la absorción

hídrica, el método de estrés, la distribución radicular...), traen consigo que el crecimiento de la vegetación, así como las variables relacionadas, difieran entre los modelos creados con cada código.

En la Figura 4-17, se muestra la variabilidad anual de la producción simulada (en peso seco; $t\ ha^{-1}$) con MOHID. Mientras que los cereales presentan una variabilidad anual inferior a $1\ t\ ha^{-1}\ año^{-1}$ en lo que a los valores medios se refiere, los cultivos de regadío varían en mayor medida que con el modelo SWAT (Figura 3-13 del apartado 3.3. *Resultados y discusión: Representación de la variabilidad espacial con SWAT*) y están, por lo general, por debajo de la producción simulada por SWAT. La producción anual de cada cultivo está cuantificada en 6, 6, 5, 8 y $10\ t\ ha^{-1}$ para los cultivos de cebada, avena, trigo, patata y remolacha, respectivamente. Es destacable que la producción de la patata simulada con MOHID está bastante próxima a la simulada con SWAT, mientras que la producción de la remolacha difiere significativamente entre ambos modelos, indicativo, probablemente, del requerimiento hídrico superior de la remolacha, que en SWAT se satisface mediante la simulación del riego.

De forma general, se observa que MOHID simula una variabilidad mayor que SWAT, lo que es indicativo de la repercusión de factores como el espesor de los suelos, la profundidad del nivel freático, la concentración de nitratos en el agua subterránea y otras variables que afectan a la producción de los cultivos que, a su vez, están influenciadas por la simulación del contenido hídrico, una variable muy dependiente de la posición espacial.

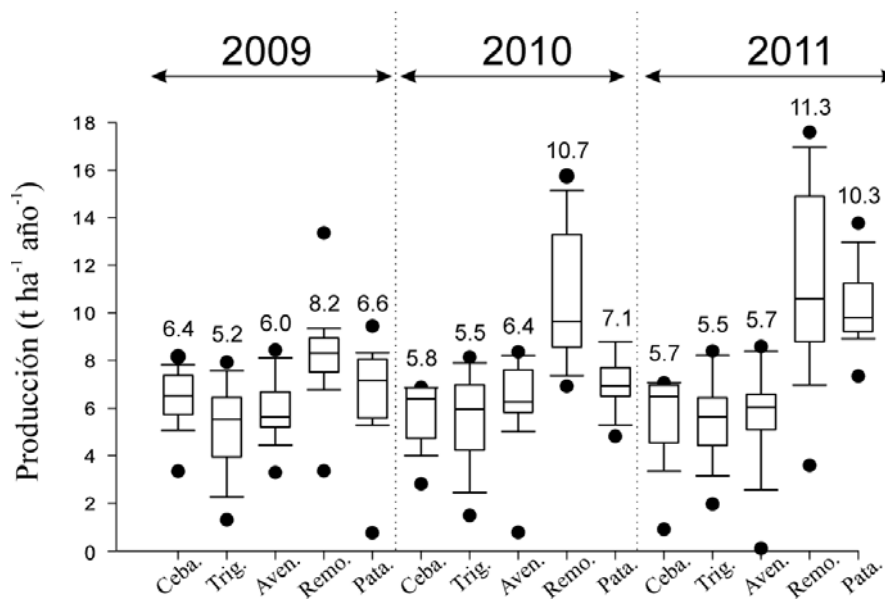


Figura 4-17. Simulación de la producción anual de los cultivos ($t\ ha^{-1}\ año^{-1}$) durante los años 2009, 2010 y 2011. Los puntos indican los valores atípicos para cada caso.

La variabilidad citada puede representarse espacialmente mediante los mapas HDF (Figura 4-18), que sirven también para visualizar la distribución de los cultivos en función de las rotaciones asignadas.

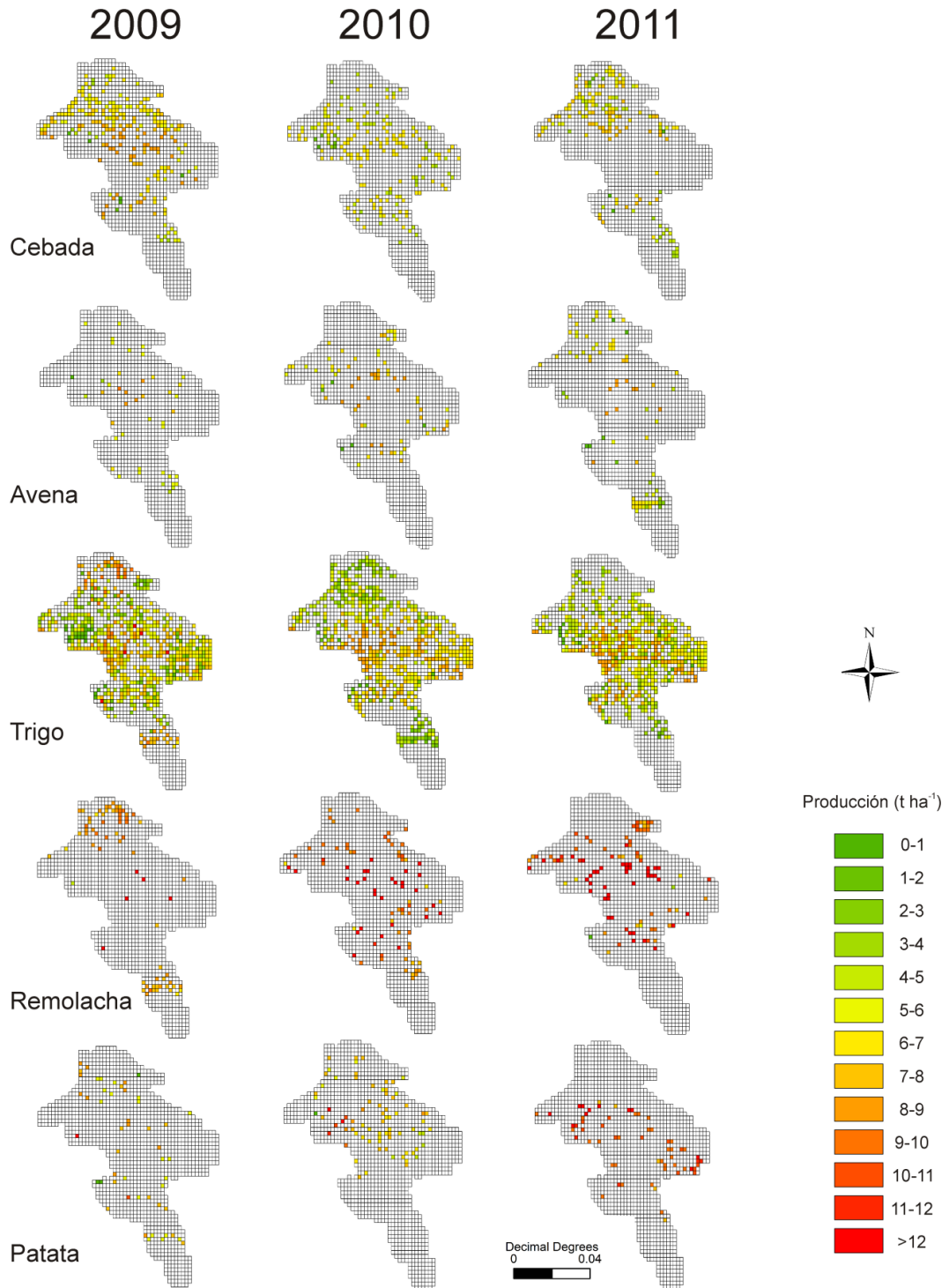


Figura 4-18. Producción anual (t ha⁻¹) de los cultivos considerados en el modelo MOHID.

En el caso de todos los cultivos puede apreciarse que, de forma general, la mayor producción se obtiene en la zona central de la cuenca, donde los suelos tienen una mayor potencia y el sistema radicular de los cultivos puede desarrollarse más fácilmente. En el caso de la remolacha y la patata, aunque más evidente para este último, puede apreciarse una producción mayor en la zona de descarga de la cuenca (Figura 4-17), en la que los suelos profundos están acompañados de un nivel freático somero (<1 m).

Por último, otra consideración a tener en cuenta es que en el caso del trigo se han considerado dos tipos de itinerarios diferentes, correspondientes al trigo de primavera y al de invierno. Si bien es cierto que el de invierno se cosecha con anterioridad al de primavera, este ocupa menor extensión y tiene una producción menor. De ahí, a que en la parte exterior de la cuenca el trigo muestre mayores producciones que en la parte central (puede observarse en el año 2009 de la Figura 4-18), lo que es atribuido a una cosecha más tardía. Por lo tanto, puede deducirse que mediante el modelo MOHID, (i) la producción simulada aumenta con la cosecha más tardía y (ii) la producción es, en general, mayor en la parte central de la cuenca.

4.2.3. Análisis de sensibilidad

Tomando como modelo base el modelo MOHID calibrado y descrito durante el apartado 4. *Simulación de procesos hidrológicos y de calidad mediante diferentes aproximaciones numéricas*, el análisis de sensibilidad ha permitido evidenciar cómo afecta el cambio (aumento y descenso del 20% del valor asignado en el modelo base) de distintos parámetros sobre diferentes variables simuladas (2.3.3. *Sensitivity analysis*). Estos parámetros son: el contenido hídrico saturado del acuífero y suelo (Θ_s ac. y Θ_s su., respectivamente), contenido hídrico residual del acuífero y suelo (Θ_r ac. y Θ_r su., respectivamente), factor de conductividad horizontal (K_h), conductividad hidráulica saturada del acuífero y suelo (K_s ac. y K_s su., respectivamente), coeficiente de Manning para la escorrentía superficial y de los canales (n -superfíc. y n -río, respectivamente), coeficiente de cultivo (K_c), concentración inicial de nitrato, carbono orgánico particulado y carbono orgánico disuelto (NO_3' , POC' y DOC' , respectivamente), constante de semisaturación del nitrato (K_{NO_3}) y la tasa de degradación del carbono orgánico particulado y del carbono orgánico disuelto (K_{POC} y K_{DOC} , respectivamente).

El hecho de conocer cuáles son los parámetros más sensibles del modelo, no sólo permite enfocar el proceso de calibración, sino que también ayuda a identificar qué parámetros tienen que medirse más detalladamente durante las campañas de campo. Sin duda, hay que tener en cuenta que la mayor o menor sensibilidad de los parámetros depende, en gran medida, de las características físico-geográficas de la cuenca de estudio (Nofziger et al., 1992; Massobrio et al., 1998) por lo que la sensibilidad de los datos aquí mencionada, sólo será efectiva bajo condiciones hidrológicas similares.

Mediante este análisis (Tabla 4-9), se han identificado el contenido hídrico saturado del suelo (Θ_s su.) y el coeficiente de cultivo (K_c) como los parámetros hidrológicos más sensibles en cuanto a la **exportación de agua** se refiere (E (mm); Tabla 4-9). Indudablemente, el K_c es el de mayor sensibilidad, pues condiciona la cantidad de agua perdida por ET repercutiendo de una forma notable al balance hídrico y, por lo tanto, a la cantidad de agua exportada a través del *outlet* de la cuenca. Concretamente, se ha cuantificado en -14% y 19% la variación de la exportación de agua al cambiar (aumentar y disminuir, respectivamente) el valor de K_c del modelo base. Entre estos dos parámetros, el cambio de Θ_s su. muestra una menor variabilidad sobre la simulación de la exportación de agua, estando cuantificada en -5% y 7% (al aumentar y disminuir, respectivamente) con respecto al modelo base.

Se puede observar que los parámetros que condicionan la velocidad del flujo (K_s su., K_s ac., K_h , Θ_r su., Θ_r ac., n -superfíc., n -río) no repercuten prácticamente sobre la exportación de

agua, siendo la variación producida en todos los casos inferior a 2% con respecto al modelo base.

En cuanto al **nivel freático** (NF (m); Tabla 4-9) se refiere, cabe destacar la baja influencia del cambio del valor de los parámetros sobre su simulación. Esto puede ser atribuido a la conceptualización de la simulación de esta variable, la cual más que a parámetros hidrológicos de los suelos (Θ_s , n o K_s), responde a factores relacionados con la extracción de agua del medio poroso (ciclos de cultivos, profundidad radicular...), tal y como lo indica el K_c . No obstante, el valor medio mostrado en la Tabla 4-9 no varía de una forma significativa, por lo que en este caso resultan especialmente interesantes los índices estadísticos que evalúan el rendimiento de esta variable. Como puede observarse, los parámetros K_c y Θ_r su. son los más sensibles en cuanto a la simulación del nivel freático, descendiendo el R^2 con el descenso del 20% de 0.78 a 0.56 en el caso del K_c , y con el aumento del 20% de 0.78 a 0.43 en el caso del Θ_r su.

La variación de la **exportación de carga de N** (Load (t); Tabla 4-9) frente a los cambios en los valores de los parámetros hidrológicos es superior en comparación con la variación de la exportación de agua (E). Además, son más los parámetros que afectan a la simulación de la exportación de carga, lo cual significa que ésta es más sensible a los parámetros hidrológicos del modelo que la simulación de la propia exportación de agua. Esto puede deberse a que la simulación de la exportación de carga no sólo responde a la exportación de agua, sino que también está influenciada por la procedencia de la misma. Esto significa que, a pesar de que el cambio de los valores de los parámetros no repercute sobre la cantidad de agua exportada, puede tener influencia sobre su procedencia, haciendo que la concentración del agua aumente o disminuya en función de la concentración en las zonas que va atravesando.

En cuanto a la **concentración de nitratos** (N-NO₃ conc (mg l⁻¹); Tabla 4-9) se refiere, puede observarse que ésta generalmente aumenta o disminuye siguiendo el mismo patrón de la exportación de carga de N. En los casos en los que no es así, su variación está atribuida a la variación de la exportación de carga con respecto al modelo base.

Un ejemplo evidente de esto es lo que ocurre con el cambio de valores de los parámetros más sensibles: K_h , K_s su., K_s ac. y K_c . Mientras que la variación de la exportación de carga provocada por el cambio del valor de K_c (-9% y 13% mediante el aumento y descenso, de su valor, respectivamente, con respecto al modelo base) responde principalmente a la variación de la exportación de agua, en el caso de los parámetros K_h y K_s , se puede observar que, con una variación mínima de la exportación de agua (un aumento o descenso máximo de 2% en todos los casos), la exportación de la carga varía en un grado significativamente mayor (un aumento o descenso mínimo de 5% en todos los casos). Esto indicaría el efecto que tiene el cambio del valor de K_c sobre la procedencia espacial del flujo y los procesos de transformación que pueden tener lugar (e.g. **desnitrificación**).

Como puede observarse, el aumento y descenso del valor de un parámetro no repercute en el mismo grado sobre la variable estudiada, algo que puede razonarse mediante la no-linealidad de los procesos (Ostrowski, 2003).

Parámetro	Δ	E (mm)	Δ E (%)	R ²	NSE	NF (m)	R ²	PBIAS	Load (t)	Δ Load (%)	R ²	NSE	N-NO ₃ conc (mg l ⁻¹)	Δ N-NO ₃ (%)	Denit (kg N ha ⁻¹ año ⁻¹)	Δ Denit (%)
Base	-	582	1	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	231	-	0.732	0.672	6.2	-	9.26	-
Θs ac.	+20%	582	1	0.769	0.756	512.69	0.78	-0.044	239	4	0.729	0.671	7.0	13	9.22	-1
	-20%	579	-1	0.766	0.748	512.69	0.78	-0.044	232	0	0.728	0.658	6.2	0	9.19	-1
Kh	+20%	588	1	0.771	0.765	512.68	0.78	-0.043	253	9	0.729	0.636	7.1	15	8.94	-3
	-20%	578	-1	0.763	0.735	512.68	0.78	-0.043	220	-5	0.721	0.683	6.2	-1	9.47	2
Θs su.	+20%	553	-5	0.726	0.723	512.67	0.68	-0.041	242	5	0.704	0.674	7.3	18	8.32	-10
	-20%	623	1	0.756	0.652	512.63	0.72	-0.032	245	6	0.685	0.470	6.2	0	10.02	8
Θr su.	+20%	588	1	0.771	0.747	512.67	0.43	-0.033	234	1	0.734	0.659	6.3	1	9.28	0
	-20%	576	-1	0.766	0.754	512.77	0.74	-0.062	227	-2	0.732	0.685	6.2	0	9.26	0
Ks su.	+20%	578	-1	0.761	0.761	512.68	0.78	-0.043	243	5	0.737	0.634	6.4	3	9.08	-2
	-20%	587	1	0.765	0.739	512.76	0.74	-0.059	218	-6	0.726	0.696	6.1	-2	9.51	3
Ks ac.	+20%	588	1	0.762	0.754	512.68	0.78	-0.042	240	4	0.730	0.682	6.9	11	9.06	-2
	-20%	579	-1	0.767	0.742	512.70	0.77	-0.046	232	0	0.728	0.653	6.3	2	9.39	2
Θr ac.	+20%	583	0	0.770	0.754	512.77	0.74	-0.062	231	0	0.733	0.675	6.2	1	9.29	0
	-20%	581	0	0.768	0.754	512.77	0.74	-0.062	231	0	0.730	0.675	6.3	1	9.24	0
n-río	-20%	580	1	0.765	0.757	512.67	0.78	-0.04	248	7	0.742	0.662	8	29	8.87	-4
n-superfíc.	+20%	583	0	0.771	0.760	512.69	0.78	-0.044	239	3	0.734	0.676	6.9	11	9.10	-2
	-20%	583	0	0.766	0.748	512.69	0.78	-0.044	231	-1	0.732	0.672	6.2	0	9.21	-1
Kc	+20%	502	-14	0.738	0.728	512.56	0.77	-0.016	211	-9	0.700	0.650	6.5	5	8.54	-8
	-20%	692	19	0.756	0.643	512.98	0.56	-0.107	260	13	0.708	0.592	6.2	-1	10.19	10
NO3'	+20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	246	6	0.735	0.659	6.9	12	9.32	1
	-20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	218	-6	0.735	0.688	5.6	-9	9.21	-1
POC'	+20%	583	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	198	-14	0.731	0.713	5.3	-15	9.96	8
	-20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	280	21	0.732	0.516	7.7	23	8.33	-10
DOC'	+20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	231	0	0.735	0.677	6.2	1	9.26	0
	-20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	231	0	0.735	0.678	6.2	0	9.26	0
K _{NO3}	+20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	234	1	0.733	0.669	6.4	3	9.2	-1
	-20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	228	-1	0.735	0.682	6.1	-2	9.34	1
K _{POC}	+20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	200	-14	0.734	0.714	5.3	-14	9.87	7
	-20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	277	20	0.731	0.526	7.6	22	8.42	-9
K _{DOC}	+20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	231	0	0.753	0.675	6.2	0	9.26	0
	-20%	582	0	0.769	0.753	512.69	0.78	-0.044	232	0	0.753	0.675	6.3	1	9.26	0

Tabla 4-9. Análisis de sensibilidad de los parámetros hidrológicos y de calidad de las aguas. Δ: variación del parámetro con respecto al modelo base (%); E: volumen de agua exportada (mm); NF: promedio de la cota del nivel freático en el pozo Zurbano-13 (m); Load: exportación de carga de N (t); N-NO₃ conc: promedio de la concentración de nitratos en el río (mgN-NO₃ l⁻¹); Denit: promedio anual de la desnitrificación (kg N ha⁻¹ año⁻¹); R²: coeficiente de determinación (-); NSE: índice estadístico Nash-Sutcliffe (-); y, PBIAS: BIAS (%). Todas las variables son calculadas para el periodo 1-Ene-2009/31-Dic-2011, los índices estadísticos relacionados con el caudal y nitratos son calculados para el periodo 21-Oct-2009/31-Dic-2011 y 28-Oct-2009/17-Jun-2011, respectivamente.

Por último, pueden destacarse el Θ_s de los suelos y el K_c como los parámetros más sensibles a la **desnitrificación** (Denit ($\text{kg N ha}^{-1} \text{ año}^{-1}$); Tabla 4-9). Estos dos parámetros evidencian los dos procesos por los que puede incrementar la desnitrificación. En el caso del K_c , la variación de la desnitrificación (-8% y 10% mediante el aumento y descenso del valor del modelo base, respectivamente) está vinculada a la simulación de un nivel freático más profundo y más somero (este último siendo el que favorece al proceso), respectivamente. En el caso del Θ_s , la variación (-10% y 8% mediante el aumento y descenso del valor del modelo base, respectivamente) se vincula a la simulación de las condiciones anaeróbicas de las celdas. Cuanto mayor es el Θ_s , se necesita un contenido hídrico superior para que las condiciones de la celda se consideren anaeróbicas. Aunque en menor medida que los parámetros citados (variación en torno a 2-3%) el K_s de los suelos y acuífero, y K_h , también repercuten sobre la simulación de la desnitrificación.

En relación a la sensibilidad de los parámetros relacionados con la calidad de las aguas, se han estudiado las concentraciones iniciales de NO_3 , POC y DOC en el medio poroso y las constantes de velocidad, K_{DOC} y K_{POC} , y la constante de semisaturación del nitrato, K_{NO_3} .

Como puede observarse en la Tabla 4-9 ninguno de los cambios produce un impacto notable en la simulación de la **exportación de agua** (E) ni en la simulación del **nivel freático** (NF). No obstante, en cuanto a la **exportación de carga de N** (Load) se refiere, los parámetros más sensibles son la concentración inicial de POC y su constante de velocidad y, en menor medida, la concentración inicial de NO_3 . Mientras que los parámetros relacionados con el POC (POC' y K_{POC}) repercuten sobre la **desnitrificación** (Denit) simulada, y de ahí el impacto sobre la exportación de carga de N, el cambio en la concentración inicial de NO_3 no afecta a la cantidad de N perdida por desnitrificación, lo que sugiere que este proceso está siendo limitado en el modelo base por la cantidad de carbono pero no por la del nitrato. Según indican los resultados obtenidos, ni la exportación de carga de N ni la desnitrificación parecen sensibles a la cantidad inicial de DOC ni a su constante de velocidad.

En el caso de la **concentración de nitratos** (N-NO_3 conc (mg l^{-1}); Tabla 4-9), debido a que el cambio de los parámetros relacionados con la calidad de las aguas no producen variación alguna en lo que a la simulación de exportación de agua se refiere, la variación simulada únicamente depende de la exportación de carga de N.

4.3. CONCLUSIONES SOBRE LA MODELIZACIÓN MEDIANTE DIFERENTES APROXIMACIONES NUMÉRICAS

La cuenca del río Alegria se ha modelizado mediante dos aproximaciones numéricas: SWAT, un código conceptual, y MOHID, uno físico. La modelización mediante las dos metodologías ha servido para evidenciar las diferencias en cuanto a la construcción y en cuanto a los propios resultados obtenidos.

Mientras que el código SWAT emplea una serie de parámetros empíricos con los que simula el flujo de agua y los procesos de transporte y transformación del nitrógeno, el código

MOHID se basa en leyes físicas para simular el flujo de agua y transporte de nutrientes, empleando relaciones empíricas para simular los procesos de transformación de éstos. Esta diferencia en cuanto a la conceptualización de los procesos, generalmente relacionada con la discretización espacial de los modelos, hace que el tiempo de ejecución requerido por cada uno difiera considerablemente, con lo que esto conlleva en relación al proceso de calibración de los mismos. No obstante, mientras que el modelo SWAT se construye a través de parámetros que necesitan ser imprescindiblemente calibrados, el modelo MOHID se crea empleando valores de parámetros que corresponden a propiedades físicas del medio, si bien es cierto que algún que otro parámetro (espesor del suelo, conductividad hidráulica saturada, factor de conductividad horizontal, concentración inicial de carbono orgánico particulado) también precisa ser calibrado debido a la heterogeneidad del medio y el grado de simplificación adoptado en el modelo.

El hecho de que MOHID sea un modelo físico totalmente distribuido (frente al modelo SWAT, modelo semi-distribuido y definido por parámetros que se mantienen constantes en toda su extensión) y, sobre todo, que esté definido mediante las propiedades físicas del medio, hace que su caracterización sea más sencilla, posibilitando la simulación de la variación espacial del nivel piezométrico. La simulación de esta variable repercute directamente sobre el espesor no saturado, contenido hídrico de las celdas más superficiales y contenido hídrico normalizado, variables que afectan directamente al transporte y transformación de agua y nutrientes. Del mismo modo, la simulación de estas variables hace que en el modelo MOHID la producción de los cultivos muestre una variabilidad mucho mayor que en el modelo SWAT. Además, la transformación de nutrientes en el modelo MOHID se calcula a través de un menor número de parámetros que en el modelo SWAT, lo que significa que los procesos en MOHID tienen una menor incertidumbre asociada a los valores escogidos, siendo dependientes, concretamente, de las condiciones hidrológicas.

En cambio, en lo que a la exportación de agua y nutrientes se refiere, los resultados indican que ambos modelos reproducen de forma satisfactoria estas variables, siendo MOHID el que muestra un mayor rendimiento de su simulación.

Si bien es cierto que MOHID todavía no es capaz de simular todos los procesos de transformación de N simulados actualmente por SWAT, se ha demostrado que mediante la simplificación de la metodología de Peyrard et al., (2011), se han obtenido resultados satisfactorios en cuanto al proceso de desnitrificación se refiere tanto a nivel de cuenca como a una escala menor.

El análisis de sensibilidad llevado a cabo de forma manual para el modelo MOHID ha destacado los parámetros más sensibles en cuanto a la exportación de agua y carga de nitrógeno, a la simulación del nivel freático y al proceso de desnitrificación. Así, en cuanto a la **exportación de agua** se refiere, se han identificado el coeficiente de cultivo (Kc) y la porosidad de los suelos (θ_s su.) como los parámetros más sensibles; no obstante, durante el proceso de calibración se identificó el Kh como un parámetro de gran sensibilidad. En cuanto al **nivel freático** se refiere, se identificó el parámetro Kc como el más sensible; no obstante, hay que considerar que el análisis de sensibilidad se realiza mediante la variación de una cantidad establecida con respecto a un modelo base, y que durante la calibración de este modelo base se comprobó que la conductividad hidráulica saturada (Ks) era uno de los parámetros más

sensibles de la variable citada. Esto, al igual que la alta sensibilidad no identificada para el parámetro K_h en lo que a la simulación de la exportación de agua se refiere, indicaría las limitaciones de un análisis de sensibilidad manual, el cual únicamente estudia la variación de una variable en función del cambio de un parámetro con respecto al valor establecido en el modelo base. En cuanto a la **exportación de carga** se refiere, se comprobó que eran numerosos los parámetros sensibles a su simulación: la porosidad del suelo y acuífero (θ_s su. y θ_s ac.), el factor de conductividad horizontal (K_h), conductividad hidráulica del suelo y del acuífero (K_s su. y K_s ac.), el coeficiente de rugosidad del río y superficial (n río y n superficial), coeficiente de cultivo (K_c), concentración inicial de nitrato (NO_3'), concentración inicial de carbono orgánico particulado (POC') y la tasa de degradación del POC (K_{POC}). Por último, en cuanto al proceso de **desnitrificación** se refiere, fueron los parámetros factor de conductividad horizontal (K_h), la porosidad de los suelos (θ_s su.), conductividad hidráulica del suelo y del acuífero (K_s su. y K_s ac.), n -superfic., n -río, K_c , K_{POC} y POC' .

4.4. REFERENCES

- Abbott, M.B., Bathurst, J.C. Cunge, P.E. O'Connell, P.E. and Rasmussen, J., 1986. An introduction to the European Hydrological System- Systeme Hydrologique Europeen, "SHE", 2. Structure of a physically-based, Distributed Modelling System. *Journal of Hydrology*, 87: 61-77.
- Aghakouchak, A. and Habib, E., 2010. Application of a Conceptual Hydrologic Model in Teaching Hydrologic Processes, *International Journal of Engineering Education*, 26(4): 963-973.
- Allen, R.G., Pereira, L.S., Raes, D. and Smith, M., 2006. Evapotranspiración del cultivo 56. Guías para la determinación de los requerimientos de agua de los cultivos. Organización de las naciones unidas para la agricultura y la alimentación. Roma, Italia.
- Arnold, J. G., Srinivasan, R., Muttiah, R. S. and Williams, J. R., 1998. Large-area hydrologic modeling and assessment: Part I. Model development. *Journal of American Water Resources Association*, 34(1): 73-89.
- Arrate, I., 1994. Estudio hidrogeológico del acuífero cuaternario de Vitoria-Gasteiz (Araba, País Vasco). Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Arrate, I., Sánchez-Pérez, J.M., Antigüedad, I., Vallecillo, M.A., Iribar, V. and Ruiz, M., 1997. Groundwater pollution in Quaternary aquifer of Vitoria-Gasteiz (Basque Country, Spain). *Environmental Geology*, 30: 257-265.
- Beven, K., 1989. Changing ideas in hydrology- the case of physically based models. *Journal of Hydrology*, 105: 157-172.
- Beven, K., 1993. Prophecy, reality and uncertainty in distributed hydrological modeling. *Advances in Water Resources*, 16(1): 41-51.
- Beven, K., 2000. Uniqueness of place and process representations in hydrological modelling. *Hydrological Earth System Sciences*, 4(2): 203-213.
- Braunschweig, F., Leitao, P.C., Fernandes, L., Pina, P. and Neves, R.J.J., 2004. The object-oriented design of the integrated water modelling system MOHID. *Proceedings of the XV international conference on computational methods in water resources*, 2: 1079-90.
- Braunschweig, F., Fernandes, L. and Lourenco, F., 2011. MOHID Studio User guide. Action modulers. www.actionmodulers.pt
- Cerro, I., 2013. Impacto de las crecidas en la calidad del agua (Cuenca agrícola del río Alegria, País Vasco). Aplicación del modelo agro-hidroológico SWAT. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Epelde, A.M., Cerro, I., Sánchez-Pérez, J.M. Sauvage, S., Srinivasan, R. and Antigüedad, I., 2015. Application of the SWAT model to assess the impact of changes in agricultural management practices on water quality. *Hydrological Sciences Journal*, 60(5): 1-19.
- EVE, 1996. Mapa hidrogeológico del País Vasco a escala 1:100000. Ente Vasco de la Energía. pp. 377.

- Feddes, R.A., Kowalik, P.J. and Zaradny, H., 1978. Simulation of field water use and crop yield. Pudoc, Wageningen. Simulation Monographs.
- Feyen, L., Vázquez, R., Christiaens, K., Sels, O. and Feyen, J., 2000. Application of a distributed physically-based hydrological model to a medium size catchment. *Hydrological Earth System Sciences*, 4(1): 47-63.
- Gassman, P.W., Reyes, M.R., Green, C.H. and Arnold, J.G., 2007. The soil and water assessment tool: historical development, applications and future research direction. *Transactions of the ASABE*, 50(4): 1211-2150.
- Gassman, P.W., Sadeghi, A.M. and Srinivasan, R., 2014. Applications of the SWAT model special section: Overview and insights. *Journal of Environmental Quality*, 43: 1-8.
- Green, C.H., Tomer, M.D., Di Luzio, M. and Arnold, J.G., 2006. Hydrologic evaluation of the soil and water assessment tool for a large tile-drained watershed in Iowa. *Transactions of the ASABE*, 49(2): 413-422.
- Güntner, A., Uhlenbrook, S., Seibert, J. and Leibundgut, C., 1999. Multi-criterial validation of TOPMODEL in a mountainous catchment. *Hydrological Processes*, 13: 1603-1620.
- Iniguez, J., Sanchez-Carpintero, I., Val, R.M., Romeo, A. and Bascones, J.C., 1980. Mapa de suelos de Alava. Vitoria-Gasteiz: Diputación Foral de Alava-Departamento de Edafología de la Universidad de Navarra.
- Jackson, B.M., 2007. Modelling water and solute transport within vegetated soils using a stochastic framework. Thesis (PhD). Imperial College London.
- Johnes, P.J., 1996. Evaluation and management of the impact of land use change on the nitrogen and phosphorus load delivered to surface waters: the export coefficient modeling approach. *Journal of Hydrology*, 183: 323-349.
- Kim, N.W., Chung, I.M., Won, Y.S. and Arnold, J.G., 2008. Development and application of the integrated SWAT_MODFLOW model. *Journal of Hydrology*, 356: 1-16.
- Lin, N., Smith, J.A. and Villarini, G., 2010. Modeling extreme rainfall, winds, and surge from hurricane Isabel (2003). *Weather Forecasting*, 25: 1342-1361.
- Liu, Y. and Gupta, H.V., 2007. Uncertainty in hydrologic modeling: Toward an integrated data assimilation framework. *Water Resources Research*, 43: 1-18.
- Madsen, H and Jacobsen, T., 2001. Automatic calibration of the MIKE SHE integrated hydrological modeling system. 4th DHI Software Conference. Helsingor, Denmark. 6-8 June.
- Massobrio, M.J., Castiglioni, M.G., Chagas, C.I. and Santanatoglia, O.J., 1998. Analisis de sensibilidad de un modelo predictivo distributivo de producción de sesimentos y nutrimentos asociados (AGNPS), en una microcuenca del arroyo del Tala, Argentina. Cátedra de Manejo y Conservación de Suelos, Facultad de Agronomía, Universidad de Buenos Aires, Av. San Martín 4453-1417. Capital Federal, Argentina.
- Merino, P., Artetxe, A., Castellón, A., Menéndez, S., Aizpurua, A. and Estavillo, J.M., 2012. Warming potential of N₂O emissions from rapeseed crop in Northern Spain. *Soil Tillage Research*, 123: 29-34.
- Meyer, P.D. and Gee, G.W., 1999. Information on hydrologic conceptual models, parameters, uncertainty analysis, and data sources for dose assessments at decommissioning sites, NUREG/CR-6656, U.S. Nuclear Regulatory Commission, Washington, EEUU.
- Moriasi, D.N., Arnold, J.G., Van Liew, M.W., Bingner, R.L., Harmel, R.D. and Veith, T.L., 2007. Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations. *Transactions of the ASABE*, 50(3): 885-900.
- Mualem, Y., 1976. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 12: 513-522.
- Muñoz, B., 2012. Impacto de fertilizantes y pesticidas en la calidad del suelo y el agua. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Neves, R.J.J., 1985. Etude experimentale et modelisation des circulations transitoire et residuelle dans l'Estuaire du Sado. Thesis (PhD). University of Liege.
- Nofziger, D.L., Chen, J.S. and Haan, C.T., 1992. Evaluation of unsaturated vadoze zone models for superfund sites. Unpublished. Oklahoma State University.

- Orang, M.N., Snyder, R.L., Geng, S., Hart, Q.J., Sarreshteh, S., Falk, M., Beaudette, D., Hayes, S. and Eching, S., 2013. California simulation of evapotranspiration of applied water and agricultural energy use in California. *Journal of Integrate Agronomy*, 12(8): 1371-1388.
- Ortuzar, M.A., 2007. Desarrollo de un sistema de fertilización nitrogenada racional en trigo blando de invierno bajo condiciones de clima mediterráneo húmedo. Thesis (PhD). University of the Basque Country (UPV-EHU)-Neiker.
- Ostrowski, M.W., 2003. Linearity of hydrological models and related uncertainty. Proceedings of the ESF LESC Exploratory Workshop. Bologna, Italy. 24-25 October.
- Pechlivanidis, I.G., Jackson, B.M., Mcintyre, N.R. and Wheeler, H.S., 2011. Catchment scale hydrological modeling: A review of model types, calibration approaches and uncertainty analysis methods in the context of recent developments in the technology and applications. *Global NEST Journal*, 13(3): 193-214.
- Peyrard, D., Delmotte, S., Sauvage, S., Namour, P., Gerino, M., Vervier, P. and Sanchez-Perez, J.M., 2011. Longitudinal transformation of nitrogen and carbon in the hyporheic zone of an N-rich stream: A combined modeling and field study. *Physics and Chemistry of the Earth*, 36: 599-611.
- Rassam, D.W., Pagendam, D.E. and Hunter, H.M., 2008. Conceptualisation and application of models for groundwater-surface water interactions and nitrate attenuation potential in riparian zones. *Environmental Modelling and Software*, 23: 859-875.
- Refsgaard, J.C., 1997. Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models, *Journal of Hydrology*, 198: 69-97.
- Sahoo, G.B., Ray, C. and De Carlo, E.H., 2006. Calibration and validation of a physically distributed hydrological model, MIKE SHE, to predict streamflow at high frequency in a flashy mountainous Hawaii stream. *Journal of Hydrology*, 327: 94-109.
- Sánchez-Pérez, J.M., Antigüedad, I., Arrate, I., García-Linares, C. and Morell, I., 2003a. The influence of nitrate leaching through unsaturated soil on groundwater pollution in an agricultural area of the Basque country: a case study. *Science of the Total Environment*, 317: 173-187.
- Sánchez-Pérez, J.M., Bouey, C., Sauvage, S., Teissier, S., Antigüedad, I. and Vervier, P., 2003b. A standardised method for measuring in situ denitrification in shallow aquifers: numerical validation and measurements in riparian wetlands. *Hydrological Earth System Sciences*, 7(1): 87-96.
- Santhi, C., Arnold, J.G., Williams, J.R., Dugas, W.A., Srinivasan, R. and Hauck, L.M., 2001. Validation of the SWAT model on a large river basin with point and nonpoint sources. *Journal of the American Water Resources Association*, 37(5): 1169-1188.
- Saxton, K.E. and Rawls, W.J., 2009. Soil Water Characteristics: Hydraulic properties calculator [Computational program]. USDA Agricultural Research Service. Version 6.02.74.
- Schaap, M.G. and Leij, F.J., 1998. Database related accuracy and uncertainty of pedotransfer functions. *Soil Sciences* 163: 765-779.
- Shaffer, M., Rojas, K., Decoursey, D. and Hebson, C., 1999. Nutrient Chemistry processes- OMNI- RZWQM, modeling management effects on water quality and crop production. Water resources publications. LLC, Colorado, EEUU.
- Srinivasan, R., X. Zhang, and J. Arnold, 2010. SWAT ungauged: Hydrological budget and crop yield predictions in the upper Mississippi river basin. *ASAE* 53(5): 1533-1546.
- Styczen, M. and Storm, B., 1993. Modelling of N-movements on catchment scale –a tool for analysis and decision making. 1. Model description. 2. A case study. *Fertilizer Research*, 36: 1-17.
- Styczen, M., M. Thorsen, A. Refsgaard, J. S. Christiansen, and S. Hansen. 1999. Non-point pollution modeling at different scales and resolution based on MIKE SHE. In: Proceedings of 3rd DHI Software Conference. Helsingør, Denmark. 7-11 June.
- Trancoso, A.R., Braunschweig, F., Chambel Leitao, P., Obermann, M. and Neves, R., 2009, An advanced modeling tool for simulating complex river systems. *Sciences of the Total Environment*, 407: 3004-3016.
- USDA-SCS; U. S. Department of Agriculture, Soil Conservation Service. 1972. National Engineering Handbook. Hydrology Section 4. Chapters 4-10. Washington, D.C.: USDA.

- Van Genuchten, M.T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44: 892-898.
- Van Liew, M.W., and Garbrecht, J., 2003. Hydrologic simulation of the little Washita river experimental watershed using SWAT. *Journal of American Water Resources Association*, 39(2): 413-426.
- Vazquez-Amábile, G.G. and Engel, B.A., 2005. Use of SWAT to compute groundwater table depth and streamflow in the Muscatatuck river watershed. *Transactions of the ASAE*, 48(3): 991-1003.
- Veith, T.L. and Ghebremichael, L.T., 2009. How to: applying and interpreting the SWAT Auto-Calibration tools. In: *Fifth International SWAT Conference Proceedings*. 5-7 August.
- Vincendon, B., Ducrocq, V., Saulnier, G.M., Bouilloud, L., Chancibault, K., Habets, F. and Noilhan, J., 2010. Benefit of coupling the ISBA land surface model with a TOPMODEL hydrological model version dedicated to Mediterranean flash-floods. *Journal of Hydrology*, 394: 256-266.
- Wagener, T., 2007. Can we model the hydrological impacts of environmental change? *Hydrological Processes*, 21: 3233-3236.
- Wheater, H.S., Jakeman, A.J. and Beven, K.J., 1993. Progress and directions in rainfall-runoff modeling. In: Jakeman, A.J., Beck, M.B. and McAleer, M.J. (Eds.). *Modelling Change in Environmental Systems*. John Wiley and Sons. Chichester, United Kingdom. pp. 101-132.
- Williams, J.R., 1975. Sediment routing for agricultural watersheds. *Water Resources Bulletin*, 11: 965-974.
- Winchell, M., Srinivasan, R., Di Luzio, M. and Arnold, J.G., 2007. *ArcSWAT interface for SWAT2005- User's guide*. Blackland Research Center, Texas Agricultural Experiment Station and Grassland, Soil and Water Research Laboratory, USDA Agricultural Research Service, Temple, Texas.

5.



BEST MANAGEMENT PRACTICES SCENARIOS SIMULATION

- 5.1. RESULTS OF THE SWAT MODELS**
- 5.2. RESULTS OF THE MOHID MODELS**
- 5.3. COMPARISON OF THE RESULTS AND DISCUSSION**

5. BEST MANAGEMET PRACTICES SCENARIOS SIMULATION

In the current chapter, it is presented the implication of the implementation of the Best Management Practices (BMP) scenarios. Different scenarios defined in the second section of this manuscript (*2.5. Construcción de los escenarios con Buenas Prácticas Agrícolas*) have been implemented to the base models created by SWAT and MOHID. Thus, the scenarios have been evaluated in terms of water export, N load export, groundwater nitrate concentration and crop yield.

Finally, it has been carried out a detailed comparison of the results obtained by the SWAT and MOHID models.

5.1 RESULTS OF THE SWAT MODELS

The results of the models in which Best Management Practices (BMP) scenarios have been implemented, have been evaluated for the period 1-Jan-2009/31-Dec-2011, as it was described in the section 2.5. *Construcción de los escenarios con Buenas Prácticas Agrícolas*.

The evaluation has been carried out by the comparison of the BMP models and the base models. Thus, the base model constructed by SWAT (SWAT BASE) has been compared to the SWAT model in which the fertilization doses were reduced (SWAT FERT) and to the SWAT model in which the irrigated crops were changed by non-irrigated crops (SWAT USO).

The evaluation of the impact of these scenarios above the water quality, allow determining which of them is the most efficient scenario in terms of crop production, N load export and nitrate concentration in the groundwater.

5.1.1. Water export

With regard to the **water export** (hm³), the two models (SWAT FERT and SWAT USO) simulate a similar water volume for the period 2009-2011, the volume simulated by SWAT FERT (29.6 hm³) being the same as that simulated by the base model and slightly higher the volume simulated by SWAT USO (29.8 hm³; Table 5-1).

Scenario	Water export (hm ³)	N load export (t)	Crop yield (t ha ⁻¹ year ⁻¹)			
			Wheat	Barley	Potato	Sugar beet
SWAT BASE	29.6	236	5.9	7.2	12.7	18.2
SWAT FERT.	29.6	227	5.8	7.1	11.9	17.5
SWAT USO	29.8	234	6.0	7.2	-	-

Table 5-1. SWAT simulated water export (hm³), N load export (t) and annual mean crop yield (t ha⁻¹) during the period 2009-2011 by the different scenarios.

5.1.2. N load export

Among the two BMP scenarios, the most effective for the environment in terms of the N losses, is the scenario in which the decrease in fertilizer doses is implemented (SWAT FERT). This scenario lowers the **N load export** (t) with regard to the base model from 236 to 227 t (decrease quantified as 4%) considering the period 2009-2011 (Table 5-1). The SWAT USO scenario slightly contributes to a decrease of the N load export, it being quantified as 1% (from 236 to 234 t) and mainly attributed to the decrease in the water volume export simulation.

5.1.3. Groundwater nitrate concentration

Another analyzed aspect is the effect of the scenarios above the **groundwater nitrate concentration** (mg NO₃ l⁻¹) which according to scientific publications is something not achieved yet with the SWAT model. In the Figure 5-1 it can be observed the groundwater concentration

simulated by the base model and the concentration simulated by the models in which the scenarios SWAT FERT and SWAT USO were implemented in January 2008.

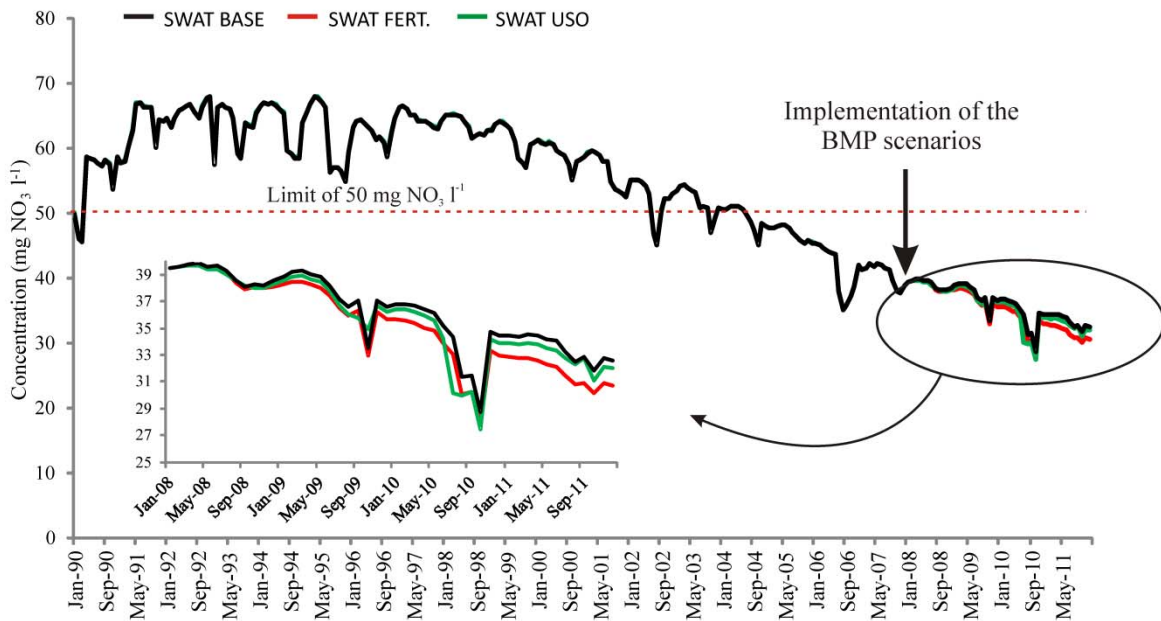


Figure 5-1. Base model (SWAT BASE) and two BMP scenarios (SWAT FERT and SWAT USO) simulated monthly nitrate concentration in the groundwater. An enlargement of the last four years (2008-2011) is shown in the center of the figure.

It needs to be highlighted that rather than the concentration values of the Figure 5-1, which is of great importance is their main tendency. It is true that most of the values here presented are lower than those measured in the Arkaute well, a well used as a reference for the groundwater pollution of the area (Arrate et al., 1997). Even though, it has to be considered that the Figure 5-1 represents the monthly groundwater concentration weighted to the HRU's extension, this being the reason why these values are far from the field data at some points.

In any case, it can be appreciated that the impact of the SWAT FERT scenario is higher than the one produced by SWAT USO and after four years since the implementation of those scenarios the base model's concentration ($32.6 \text{ mg NO}_3 \text{ l}^{-1}$) descend to 30.7 and $32 \text{ mg NO}_3 \text{ l}^{-1}$, respectively, which supposes a decrease of 6 and 2%.

5.1.4. Crop yield

As it can be observed in the Table 5-1, the **crop yield** ($\text{t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$) varies very slightly with the implementation of the scenarios. After decreasing the fertilization doses (SWAT FERT), the simulated crop yield decrease for every crop: the simulated yield of wheat, barley, potato and sugar beet decrease from 5.9 to $5.8 \text{ t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, from 7.2 to $7.1 \text{ t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, from 12.7 to $11.9 \text{ t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$ and from 18.2 to $17.5 \text{ t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, respectively. This could indicate that the fertilization doses established in the base model are close to the crop requirements. With regard to the land use change scenario (SWAT USO), it can be said that in almost every case the crop yield increases although it is practically inappreciable with the used units. With the implementation of this scenario, the wheat's and barley's yield is quantified as $6.0 \text{ t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$

and 7.2 t ha⁻¹ year⁻¹, respectively. For both scenarios it is not considered the oat crop, as it is simulated with barley crop as it was defined in the section 2.4.1.3. *Información agronómica*.

At this point, it is remarkable the slight increase on the crop yield mentioned above, as it could indicate the positive effects of an appropriate agricultural management achieved without the increase of fertilizers, something that could be interesting not only for the administration but also for the farmers.

5.2 RESULTS OF THE MOHID MODELS

The results of the models in which BMP scenarios have been implemented, have been evaluated for the period 1-Jan-2009/31-Dec-2011, as it was described in the section 2.5. *Construcción de los escenarios con Buenas Prácticas Agrícolas*.

The evaluation has been carried out by the comparison of the BMP models and the base models. Thus, similarly to SWAT, the base model constructed by MOHID (MOHID BASE) has been compared to MOHID FERT and MOHID USO.

5.2.1. Water export

With regard to the **water export** (hm³), the MOHID FERT scenario does not carry any change, the amount simulated by this model and being 31.2 hm³ during the period 1-Jan-2009/31-Dec-2011. The MOHID USO simulated water export is quantified as 31.4 hm³ (Table 5-2).

Scenario	Water export (hm ³)	N load export (t)	Crop yield (t ha ⁻¹ year ⁻¹)				
			Wheat	Barley	Oat	Potato	Sugar beet
MOHID BASE	31.2	231	5.4	6.0	6.0	8.0	10.1
MOHID FERT.	31.2	191	4.8	5.7	5.1	7.3	9.0
MOHID USO	31.4	224	5.7	6.0	6.0	-	-

Table 5-2. MOHID simulated water export (hm³), N load export (t) and annual mean crop yield (t ha⁻¹) during the period 2009-2011 by the different scenarios.

5.2.2. N load export

The decrease on fertilizer use has a more notable impact above the **N load export** (t). Whereas the decrease produced by MOHID USO lowers the N export from 231 to 224 t (quantified as 3%), the MOHID FERT scenario lowers the N export from 231 to 191 t, decrease quantified as 17% with regard to the base scenario (Table 5-1).

5.2.3. Groundwater nitrate concentration

With the objective of studying the impact of the scenarios above the **groundwater nitrate concentration** (mg NO₃ l⁻¹), instead of analyzing different emplacements individually, the results were gathered in order to obtain values more representative of a larger scale. Thus,

according to the methodology employed in the section 4.2.3.2. *Nutrient transport and transformation processes*, it was calculated the daily mean nitrate concentration of the saturated zone for the seven locations where the wells are emplaced.

It was observed that the MOHID USO scenario did not show a clear evidence of the nitrate pollution mitigation, the concentration simulated being sometimes higher and sometimes lower than that simulated by the base model (Figure 5-2). However, the MOHID FERT scenario seems to simulate a lower concentration than MOHID BASE along all the studied period. In fact, after four years since the implementation of the scenarios, the simulated concentration lowers from 30.3 mg NO₃ l⁻¹ in MOHID BASE to 29.8 and 27,8 mg NO₃ l⁻¹ by MOHID USO and MOHID FERT, respectively, which supposes a decrease of 1 and 8% according to the base model simulated results.

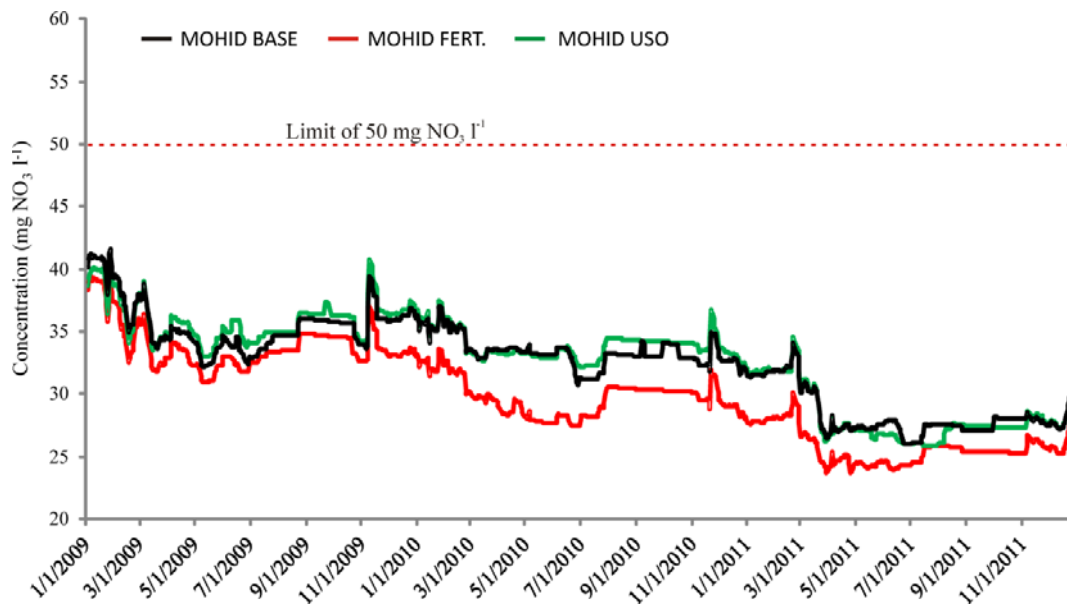


Figure 5-2. Base model (MOHID BASE) and two BMP scenarios (MOHID FERT and MOHID USO) simulated monthly nitrate concentration in the groundwater.

5.2.4. Crop yield

With regard to the **crop yield** (t ha⁻¹ year⁻¹), the MOHID FERT scenario involves a significant decrease on the simulated yield. The decrease being more accentuated in the case of the potato and sugar beet. The cereals (wheat, barley and oats) decrease from 5.4 to 4.8 t ha⁻¹ year⁻¹, from 6.0 to 5.7 t ha⁻¹ year⁻¹ and from 6.0 to 5.1 t ha⁻¹ year⁻¹, respectively. The tubers (potato and sugar beet) decrease from 8.0 to 7.3 t ha⁻¹ year⁻¹ and from 10.1 to 9.0 t ha⁻¹ year⁻¹, respectively (Table 5-2). This suggests that in the case of tubers the decrease of the fertilizer use carries an important N deficit, affecting in a more notable way the simulated crop yield. It has to be reminded that in the MOHID models the irrigation practice is not being considered and that is the reason why the simulated crop yield is, in any case, lower than that it could be obtained if this practice was considered.

The MOHID USO scenario increments very slightly the simulated crop yields, the increments being inappreciable in some cases (Table 5-2). Thus, the barley's and oats' yield

seems to be maintained in $6.0 \text{ t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$, whereas that of wheat increases from 5.4 to $5.7 \text{ t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$. The fact the yield of the cereals is lower when potato and sugar beet are considered in the crop rotations, can be attributed to a higher N uptake by the tubers comparing to the cereals (Krysanova and Haberlandt, 2002). This higher uptake would considerably decrease the nutrients that remain in the soil, leaving less amount of N for the following crops and, consequently, the simulated crop yield would be lower.

5.3 COMPARISON OF THE RESULTS AND DISCUSSION

The **change in the land use** (USO) slightly increases the water export (hm^3) simulated by the SWAT and MOHID models, the variation with regard to the base models being in both cases, lower than 1%. This variation can be attributed both to the differences in the water requirements by the different crops and to the differences in the crop cycles.

This scenario, indeed, carries a light decrease on the simulated N load export (t) with regard to the base scenario, which can be quantified for SWAT and MOHID models, respectively, as 2 (decrease of 1%) and 7 t (decrease of 3%). While it is true that this decrease is mainly attributed to the change of some crops (potato and sugar beet) by other (wheat) that receives a lower amount of fertilizer, it would have been expected that the simulated decrease with the SWAT model was higher, as the practices concerning the tubers include also the irrigation technique. This, favouring in principle, the N leaching in agricultural watersheds (Broeke, 2001; Stowe et al., 2010). The fact the N load export decreases so slightly with the change in land use, can be linked to the idea of most of the irrigation water volume is being absorbed by the vegetation as if this wouldn't be so, with the change in the land use a more notable difference in N load export would be expected.

With regard to the groundwater NO_3 concentration (mg l^{-1}), it can be said that both SWAT and MOHID models (USO) simulate a decrease 2 and 1%, respectively, after a period of four years.

This scenario does not practically change the simulated crop yield of the cereals, the yield of the wheat being slightly increased according to the base models. This increase with regard to the base model is quantified as 0.1 and 0.3 t ha^{-1} for the SWAT and MOHID models, respectively.

The **decrease in the fertilizer doses** (FERT) shows the highest impact on the N load export (t), groundwater nitrate concentration (mg l^{-1}) and agricultural production ($\text{t ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$) both by SWAT and MOHID models. This scenario does not have any impact above the water export simulation (hm^3).

While the SWAT model simulates a decrease on the N load export of 9 t (4% less than the base model), MOHID shows a more notable affect, the decrease being quantified as 40 t (17% less than the base model). At this point, what appears of great complexity, is deciding which of the model gives more accurate results, as the difference is notable but impossible to

verify. According to the literature, the effects of the 20% decrease of fertilizer doses can vary in a wide range depending of the agro-hydrological conditions of the watershed. Vagstad et al., (2009) found that after decreasing the doses a 20%, the N load export decreased a 3%. However, Laurent and Ruelland (2011) found that the same decrease in the doses contributed to a N load export decrease of 19%.

If it is considered the physics-based nature of the MOHID model in comparison with the conceptual nature of SWAT, the water and nutrient movement are better simulated, in principle, by the MOHID model as it calculates the water and nutrients flow according to the physical laws. However, there are many processes that are simulated according to empirical parameters, such as water and nutrient uptake by the vegetation or the N turnover processes. Still, it is thought that MOHID can represent more efficiently the real processes, as this model is the one which better simulates the water table level and water content in soil; variables that highly influence the processes related to N loss or transformation (see 4.3.3. *Sensitivity analysis*). It is believed, too, that if more field data were available, the evaluation of the obtained results and the evaluation of SWAT and MOHID simulated differences would be easier, as in this work only wide ranges from the literature haven been used for the evaluation of some results.

The groundwater NO_3 concentration (mg l^{-1}) is notably affected after the implementation of this kind of scenario. According to SWAT and MOHID, after four years since the implementation, the nitrate concentration decrease on 6 and 8%, respectively. As it can be appreciated, the difference between both model's results in terms of concentration is much shorter than that related to N load export, probably due to the scale differences for the results representation. Whereas the SWAT model simulated groundwater concentration is represented as the extension weighted value, in the case of MOHID the concentration is a mean obtained from simulated data at several locations.

In any case, it can be seen that since the implementation of any scenario in 2008 it is required a time lapse until their effect can be appreciated above the water quality, as described by other authors (Granlund et al., 2005; Epelde et al., 2015). In this work, it is evidenced that with the passing of time the positive effect of the BMP scenarios increases progressively. Concretely, the SWAT model suggests that at least four years are needed to achieve the optimum conditions carried by the implemented scenarios.

The obtained differences by the employed numerical codes indicate a certain subjectivity of the use of management tools above the results of the study. This means that although the use of these tools can be of great help in environmental management studies, their results must be careful and critical in any case. Concretely, when the work is carried out at large spatial scales, as they are the hydrographic watersheds, the numerous assumptions that need to be taken as well as the wide value ranges used for the calibration of many processes, involve that the values obtained from the modeling process can't be used with total credibility as they imply a certain degree of associated uncertainty. Thus, rather than the absolute values obtained from the modeling process, what appear to be of great importance when modeling approaches are used, are the general tendencies and the option of the evaluating which are the most efficient scenarios to mitigate an environmental problem.

5.4. REFERENCES

- Arrate, I., Sanchez-Perez, J.M., Antigüedad, I., Vallecillo, M.A., Iribar, V. and Ruiz, M., 1997. Groundwater pollution in Quaternary aquifer of Vitoria-Gasteiz (Basque Country, Spain). *Environmental Geology* 30: 257-265.
- Broeke, M.J.D.H., 2001. Irrigation for optimizing crop production and nitrate leaching on grassland. *Agricultural Water Management* 49: 97-114.
- Epelde, A.M., Cerro, I., Sánchez-Pérez, J.M. Sauvage, S., Srinivasan, R. and Antigüedad, I., 2015. Application of the SWAT model to assess the impact of changes in agricultural management practices on water quality. *Hydrological Sciences Journal*.
- Granlund, K., Raike, A., Ekhol, P., Rankinen, K. and Rekolainen, S., 2005. Assessment of water protection targets for agricultural nutrient loading in Finland. *Journal of Hydrology*, 304: 251-260.
- Krysanova, V. y Haberlandt, U., 2002. Assessment of nitrogen leaching from arable land in large river basins. Part I. Simulation experiments using process-based model. *Monit. Assess.* 183: 351-379.
- Laurent, F. and Ruelland, D., 2011. Assessing impacts of alternative land use and agricultural practices on nitrate pollution at the catchment scale. *Journal of Hydrology* 409: 440-450.
- Stowe, D.C., Lamhamedi, M.S., Carles, S., Fecteau, B., Margolis, H.A., Renaud, M. and Bernier, P.Y., 2010. Managing irrigation to reduce nutrient leaching in containerized white spruce seedling production. *New Forests* 40: 185-204.
- Vagstad, N., French, H.K., Andersen, H.E., Behrendt, H., Grizzetti, B., Groenendijk, P., Hejzlar, J., Stromquist, J., Deelstra, J. and Siderius, C., 2009. Comparative study of model prediction of diffuse nutrient losses in response to changes in agricultural practices. *Journal of Environmental Monitoring*, 11: 594-601.

6.



DISCUSSION AND CONCLUSIONS

6.1. INTEGRATED DISCUSSION

6.2. CONCLUSIONS AND PERSPECTIVE WORK

6. DISCUSSION AND CONCLUSIONS

The current chapter presents the general discussion of the methodology used to achieve the objectives of the study and the obtained results. The principal conclusions obtained from this work are highlighted and the manuscript concludes with the perspective work and the recommendations.

6.1. INTEGRATED DISCUSSION

6.1.1. Implications of the employed methodology

The impact of the agricultural practices on the environment, affecting the quality of both soil and water, is a matter of concern for the current society. Thus, it is an aspect being deeply studied and which is being controlled by different environmental regulations implemented by the European Union. In order to develop new strategies as well as to carry out the evaluation of the implemented measures at large temporal and spatial scales, water quality models appear to be useful management tools for the agricultural policy and regional landscape development programs. Nowadays, the use of this kind of models is quite spread among different fields, being the research community of the most important ones. According to the scientific literature, the nonpoint source pollution contributed by the agriculture in Europe is being addressed by different water quality numerical codes.

Concretely, one of the most widely used codes is SWAT (Soil and Water Assessment Tool), which enables to create watershed scale models considering the main hydrological and water quality-related processes at large spatial scales. SWAT is a semi-distributed conceptual model that due to the simplifications generally assumed on it (e.g. constant parameters' values over the study area), leads to a rather simple and fast calibration process. Indeed, the extent scientific literature proving the ability of SWAT to satisfactorily simulate water and nutrient export from large watersheds proves that its conceptual nature captures the necessary processes to reproduce this kind of variables. However, this conceptual consideration of the physical processes as well as the semi-distributed spatial discretization, assumes the lack of interaction between the HRUs and the lack of water movement from the rivers to the porous media, which represent some of the limitations of the SWAT model. Actually, the simulation of the groundwater is one the limitations of this model. The groundwater level fluctuation at HRU scale depends on the soil and aquifer related parameters, which, in order to simulate this variable for a given HRU (Hydrologic Response Unit; discretization unit of the SWAT model), should be individually calibrated making this process difficult and laborious. Indeed, taking into account that the properties defined for a given HRU do not influence over the adjacent HRUs, trying to adjust the spatial variability of this variable would be completely senseless. In any case, in the current Thesis work it has been shown that a satisfactory groundwater table fluctuation can be obtained if the calibration process is focused on it.

Something to be specially considered is the good simulation of the groundwater nitrate concentration. Although SWAT does not simulate explicitly this variable, considering the water volume and nitrogen load export by each HRU to the river and weighting them by each HRU extension, it has been possible to reproduce the groundwater nitrate concentration tendency observed in the the Alegria River watershed. Effectively, at a lower temporal scale the concentration obtained for a given HRU depends on the meteorology, soil type, agricultural practices and also on the carbon content that influences processes such as nitrogen mineralization or denitrification. This carbon content is established constant throughout the simulation period, without any consideration of C addition or extraction (with the crop residues when they are harvested or by carbon mineralization, for instance). This conceptualization

makes that the nitrogen amount in the system (e.g. system mass balance or the nitrate groundwater concentration) does not reflect the intra annual changes caused by carbon concentration variation, which is essential for the nitrogen turnover processes occur and, in turn, it is controlled by the defined carbon content.

In fact, this carbon content has been identified on this study as the main influential factor for the satisfactory simulation of the groundwater nitrate concentration. It has been observed that the model in which thick soils were defined, with the subsequent higher amount of carbon, the nitrogen mineralization amount was higher than in the model with thinner and lower C content soils. The higher N input caused by mineralization leads to higher nitrate availability for the crops, which find enough N that satisfies their nutrient demand, and higher nitrate leaching to the aquifer. On the contrary, in the case of the model with lower mineralization rates, it is not obtained a good representation of the groundwater nitrate concentration as it is observed a notable fluctuation of this variable decreasing to values of around 0-5 mg NO₃ l⁻¹ during the summer season. This has been attributed to the N uptake by plants that in this case, where the amount of N is lower attributed to lower mineralization rates, carries out a depletion of soil N decreasing significantly the nitrogen leaching to the aquifer. As it has been mentioned above, in this aspect, it would be interesting to be able to evaluate which of the models is considering the processes more efficiently but this is a quite complicated task when working with literature based processes' ranges. In any case, it has to be carefully considered that other established variables (such as land use, crop cycles and fertilizer input) also have impact on the simulated processes and so, in watershed scale studies, special attention should be paid at the time of interpreting the obtained results, without forgetting the objectives for which the model was created.

With regard to the nitrogen transformation processes, SWAT has satisfactorily reproduced them in the different models here presented. Although the rates of these processes vary according to the model, owing to the need of validating them with values reported by the literature, which usually are wide, it is not possible to establish a clear criteria that helps deciding which are the models that simulates the processes more accurately.

With the aim of comparing the conceptual models with a physics-based model in terms of model construction and simulated results, a fully distributed and physics-based model was constructed by the MOHID (Modelo Hidrodinâmico) water modeling system. This model allowed the more accurate simulation of water and N load export, although due to its physics-based nature, its calibration was very time consuming. Indeed, its limited documentation (published papers and user guides) makes the first contact with this code to be especially complex. The lack of documentation is indeed attributed to the development stage of the code, which is currently at full development since its incorporation to the code in year 2004.

In this sense, this Thesis work has contributed to MOHID users community by identifying several bugs in the code as well as different aspects not regarded yet by the code and necessary to carry out watershed scale studies. The close relationship with the developer team has allowed the incorporation of the following aspects:

- Fix of different bugs in the executable files (related to bathymetry file construction, input of data, problems with model projection...).

- A water balance.
- Streamflow water volume integration for the selected time step.
- The crop ID is given when selecting it from the HDF file.

Another aspect that has been lately introduced to the code within the framework of Attenagua project (EU Interreg SUDOE IVB program; SOE3/P2/F558) is the option of simulating the denitrification process without the need of activating the Sediment Quality module. This option allows considering a denitrification process simplification. In fact, this study, as well as other research projects that are currently being carried out, has evidenced the satisfactory performance of the model to simulate denitrification process both at watershed and plot scales.

Even though, there are some aspects that could be discussed regarding this methodology. Whereas the nitrate pool considered for denitrification process is the same as that for fertilization or plant N uptake, POC and DOC pools are disconnected from those pools defined in Sediment Quality module, which means that whereas the carbon associated to the crop residue is added to one pool related to organic carbon, the denitrification process will not take into account this C input and will response to the concentration in the POC pool which will decrease according to the initial concentration and the rate constant of the POC degradation. Although it is thought that this approximation is valid for short periods, it needs to be considered its validity for longer ones where the depletion of these pools can have a notable effect on the simulated denitrification rate.

Another aspect that has been carefully studied is the characterization of the POC pool. Although some quality codes simplify in a high degree the interaction between the carbon with other nutrient cycling processes (in which usually, if present, the carbon pool is characterized by field measured soil carbon content), in the case of MOHID, the distinction of carbon according to its bioavailability seems to be minutely considered. In fact, the Sediment Quality module requires for every pool (particulate and dissolved) the division between the fractionary and labile fractions. After going in depth about the nutrient bioavailability importance for processes carried out by the microorganisms, it was decided to follow this approach, and the POC pool was characterized by the half of total organic carbon measured on field. In any case, for a better characterization of this pool it is thought that more field data would be required.

Another important aspect to be considered if this methodology is used is the lack of consideration of the mineralization process. According to the literature, the mineralization process can vary in broad ranges, depending on different factors such as harvesting techniques, tillage practices, soil characteristics, fertilization management or meteorological conditions. In this study, in order to consider the input of N to the nitrate pool it was thought to obtain an estimate value from the SWAT model results. At the time this alternative was considered, the mineralization amount was estimated at $137 \text{ kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$. As a first approximation, it was tried to input the corresponding monthly amount but after observing the high amount of N leaching caused by it, it was corrected into weekly inputs. This significantly improved the N export. Even though, due to the lack of a mass balance, the quantification of the plant uptake by the two models, the monthly and weekly, was not possible. In any case, another trial was carried out in order to input the N at a daily basis, but the code seemed to have problems handling with the large text file created. An alternative to not create a text file, in which daily

management was defined, was to use the continuous fertilization option. By this option, the corresponding daily mineralization amount was established in the model so that it should consider a daily fertilization input, but in this case, it was observed that the code read the continuous fertilization for first days and after, without any error message, it stopped. Considering all this, it was thought that the best approximation was to simulate the mineralization process in the MOHID model as if it was a weekly fertilizer N input. Whereas this approach lead to a satisfactory N load export simulation, the explicit N mass balance is estimated crucial to better understand which are the processes affecting the N cycle.

The aspects mentioned above contribute to the uncertainty of the model and it is important to keep them in mind to better interpret obtained results. It is thought that this uncertainty increases with the model complexity due to the lack of information that allows the calibration of all the simulated aspects. In this case, the data used for the calibration of the model are discharge, water table level and N load at the watershed outlet, so these are the only variables that will be possible to evaluate. The rest of the simulated variables will be evaluated according to the literature reported data and will inevitably involve certain uncertainty.

Another issue that needs to be here considered is the use of different executables created for SWAT and MOHID codes. In the first case, two executables were employed being the SWAT-2009 replaced by SWAT-2012 after a numerical error had been found. The change of executables brought a notable variation on the simulated variables, as shown in the following section. This variation is attributed to both the fix of bugs present in the previous version of the code and also the consideration of new parameters that are defined by default values. In the case of MOHID, the intense development stage, in which it currently is, makes numerical bugs and new implementations are constantly being updated in the code which the subsequent release of new executable versions. Thus, several executable files have been used for MOHID model construction but, in this case, there has not been observed a notable variation in the simulated variables.

6.1.2. The performance of the calibrated models

Most of the models presented in the current Thesis work have shown satisfactory results with regard to the simulation of **hydrological processes**. With the exception of the modeling stage in which the water table simulation was tried to adjust by the SWAT model (not shown in Table 6-1), in the rest of the cases both SWAT and MOHID have given satisfactory results for the discharge simulation (Table 6-1). As it can be observed, MOHID simulates the water export (22 hm³) more precisely according to observed data (23 hm³), also shown by the statistical indices both at calibration and validation periods.

There are different parameters to which these differences can be attributed to. On the one hand to the parameters that control the infiltration process. Whereas the SWAT model calculates the infiltrated water volume according to the curve number method, the MOHID model uses Richard's equation. Thus, SWAT calculates the daily infiltrated amount based on the empirical parameter CN established for the land use and soil type, which is daily updated according to the antecedent moisture conditions. Although there is the possibility of entering new curve number values for management operations (such as harvest and kill, tillage or plant

operations) in this study, for simplification, it was decided not to change the CN value during management operations so as its initial value (according to land use and soil type) was changed only due to soil moisture variations. This means that for a given precipitation event, the soils generate low runoff if they are dry (wilting point conditions) and they generate high runoff if they are wet (field capacity), being the generated runoff controlled by three CN values: Moisture condition I, condition II and condition III, respectively. In the case of MOHID, the infiltration is controlled by the hydraulic gradient and the van Genuchten parameters. These, although are assumed constant in time (a fact that has already been discussed in the literature and is thought to have a big impact above the simulated results) will allow each moisture content to affect differently to the infiltration process. Even though at watershed scale both approaches have shown satisfactory simulation of the infiltration process, it is thought that for smaller scales, the approach used by MOHID will give more accurate results.

	Water export (hm ³)	Daily NSE Cal.	Daily NSE Val.
Observed data	23	-	-
SWAT (Agricultural practices impact/ SWAT-2009)	24	0.59	0.72
SWAT (Agricultural practices impact/ SWAT-2012)	20	0.54	0.66
SWAT (Spatial variability representation)	25	0.66	0.56
MOHID	22	0.74	0.77

Table 6-1. Observed and simulated water export (hm³) for the period 21-Oct-2009/ 31-Dec-2011 and the daily NSE statistical index for calibration and validation periods.

On the other hand, the parameters controlling the evapotranspiration process as well as the method for its reference value calculation can impact greatly on its simulation. The Penman-Monteith method, in principle, is supposed to provide more accurate results, as it is based on the energy needed to sustain evaporation, the strength of the mechanism required to remove the water vapor and aerodynamic and surface resistance terms. However, it has been reported that this method makes the most accurate estimates when the reference evapotranspiration is calculated at hourly basis, potentially leading the daily mean values to significant errors. In fact, a model constructed by SWAT simulated quite low evapotranspiration by Penman-Monteith (around 40% of the precipitation), being this the main reason for having selected the Hargreaves method for the following models.

The Hargreaves method, as well as the rest of the evapotranspiration related parameters, simulated the evapotranspiration-related data shown in Table 6-2. As it can be seen, from the three SWAT models the one constructed with SWAT-2012 executable and with the objective of simulating the agricultural practices impact presents higher water loss by evapotranspiration, something that is inevitably related to changes in the code that contribute to this difference, as the model characterization and parameterization (empirical parameters that simulate water deficit compensation) was equal with respect to the previous model.

This change decreased the model performance in terms of discharge simulation, but as it is shown in Table 6-1, according to satisfactory statistical indices this model was considered adequate with the same parameterization.

	IN (Precipitation + Snow/Irrigation) (mm year ⁻¹)	ET (mm year ⁻¹)	ET/IN (%)
Observed data	575 ^a , 464 ^b , 619 ^c	-	-
SWAT (Agricultural practices impact/ SWAT-2009)	579+45	396	63
SWAT (Agricultural practices impact/ SWAT-2012)	579+45	437	70
SWAT (Spatial variability representation)	579+45	396	63
MOHID	574	390	64

Table 6-2. Simulated evapotranspiration and ET/IN ratio by different models for the period 01-Jan-2009/ 31-Dec-2011 (^a, ^b and ^c correspond to the Alegria, Arkaute and Kapildui meteorological stations, respectively).

In the case of MOHID, the evapotranspiration (which can only be calculated by the Penman-Monteith method) is not controlled by any depth compensation parameter but the crop coefficient (Kc) is used to calculate potential evaporation and transpiration values from the reference evapotranspiration value. In this study, it has been observed the sensitivity of this parameter on the simulated evapotranspiration and thus, on the simulated discharge. The model was characterized by monthly Kc values, which proved to be adequate to satisfactorily simulate daily discharge. It has to be highlighted that due to the fine temporal discretization of the MOHID model it is able of simulating detailed discharge values, something of great importance for high flow simulation or flood assessment studies. However, in this case, it was employed the daily integrated discharge obtained by MOHID, something needed in order to evaluate SWAT simulated results by a physics-based model.

With regard to the **nutrient transport**, both codes simulate this process quite differently. Whereas the SWAT model employs empirical parameters or equations that govern the nutrient transport, MOHID bases it on physical laws. Thus, the transport is governed by advection and hydrodynamic dispersion (which considers both molecular diffusion and mechanical dispersion).

The nutrient load export, variable for which the models presented in this study were calibrated, is affected, though, by a series of N cycle related processes. Although the formulation in both SWAT and MOHID codes employs empirical relationships, there are not considered the same processes in both codes, which make indispensable simplifications as that adopted for mineralization simulation in the MOHID model. Taking this into account, in the Table 6-3 there are shown observed and simulated N export values for the period 28-Oct-2009/ 17-Jun-2011.

	N load export (t)	Daily NSE Cal.	Daily NSE Val.
Observed data	136	-	-
SWAT (Agricultural practices impact/ SWAT-2009)	129	(0.77) 0.33	(0.75) 0.55
SWAT (Agricultural practices impact/ SWAT-2012)	143	0.41	0.50
SWAT (Spatial variability representation)	94	0.67	0.39
MOHID	130	0.64	0.69

Table 6-3. Observed and simulated N load export (t) for the period 28-Oct-2009/ 17-Jun-2011 and the daily NSE statistical index for calibration and validation periods. Values in brackets correspond to statistical indices obtained by the comparison of simulated load against load obtained by simulated discharge.

Similarly to water export simulations, N load simulation is reproduced more precisely by MOHID model, which simulates for the period 28-Oct-2009/ 17-Jun-2011 an export of 130 t N, being the observed value 136 t N, something also evidenced by the statistical indices both at calibration and validation periods.

This study proves the ability of the simplification of Peyrard's methodology for denitrification process simulation. According to this formulation, at the watershed scale 9 kg N-NO₃ ha⁻¹ year⁻¹ were lost for the period 01-Jan-2009/ 31-Dec-2011, whereas SWAT model simulated 14 kg N-NO₃ ha⁻¹ year⁻¹, values within the ranges reported in literature for agricultural areas. This study has evidenced the ability of the MOHID model to fit denitrification rates in a thinner temporal scale, even though, SWAT provides satisfactory results with the need of fewer parameters. In this sense, the SWAT model requires three parameters (CDN, C_{org} and SDNCO) and two variables (soil nitrate concentration and temperature), and MOHID, five parameters (DOC and POC decay rates, half saturation of the nitrate, porosity and density) and four variables (POC, DOC and nitrate concentration and anaerobic conditions).

The spatial variability of the water content in soils and groundwater flow in the MOHID model allow the representation of the spatial variability of different aspects not regarded by the SWAT model. Particularly, the spatial variation of the denitrification process as well as the crop yield simulation and other variables depending on the water table position and the soil water content, will be only obtained by the physics-based and totally distributed models. Similarly, even if this study shows that the groundwater nitrate concentration trend has been satisfactorily simulated by SWAT after some assumptions are made, the spatial variation of the concentration will only be reproduced by the totally distributed models.

Furthermore, considering all the methodological aspects mentioned in the current Thesis work, it is important to highlight that the MOHID model has been the first model that has allowed the simulation of variables such as discharge, water table depth and nutrient related processes in the Alegria River watershed, something that, until now, had only been achieved by other authors in the same study area by the individual simulation of the different processes.

6.2. CONCLUSIONS AND PERSPECTIVE WORK

6.2.1. Principal conclusions

Due to the fact that on previous chapters a conclusion section has also been included, at the current section only the major conclusions obtained from this research are comprised.

1. Simulated agricultural practices have allowed to satisfactorily simulate the **discharge** at the watershed outlet by SWAT and MOHID models, the results obtained from the latter being the most accurate.

2. Simulated N cycle related processes have given values according to the literature (mineralization, denitrification and plant uptake in SWAT; denitrification in MOHID), which have enabled the proper simulation of **N load export**.
3. The simplification adopted in the MOHID code with regard to the denitrification method has reproduced the denitrification rates both at watershed and plots scales according to values in the literature, being the parameters related to the particulate organic carbon the ones most affecting this process.
4. Some differences in the watershed **conceptualization** have led to different SWAT models which, with the exception of that focused on the water table fluctuation simulation, have simulated discharge and N load satisfactorily and different N turnover rates within literature ranges. This implies the **impossibility of categorizing** the models in terms of N cycle related processes simulation accuracy.
5. The SWAT model which simulates higher N mineralization rates has allowed the reproduction of the annual groundwater nitrate concentration by a HRU extension weighing approach. With this model, it has been possible to satisfactorily simulate with the **groundwater nitrate concentration tendency** observed in reality during the last 21 years.
6. Only the spatial discretization of the MOHID model allows the representation of the **spatial variation of the groundwater nitrate concentration** and groundwater table position. Whereas in the SWAT model these variables can be adjusted only if the calibration process has been focused on the same HRU where the results are being checked, in the case of MOHID the calibration of the parameters that control the water table position at spatially distributed locations has shown to properly simulate the piezometric surface.
7. This representation of the spatial variation of the groundwater-related aspects (water table depth and saturation of soils derived from ground water table rising) makes MOHID model to be more adequate to simulate the **spatial variation** of some processes that are affected by these aspects (e.g. water uptake by the vegetation, denitrification); that, in the case of SWAT, depend on the meteorological conditions, crop type and management, and soil characteristics.
8. Although, in principle, the MOHID model does not require any calibration procedure for the simulation of hydrological processes, due to the field data representativeness and field heterogeneity some of the model parameters needed to be adjusted in order to fit the distributed (water table level) and integrated (discharge) simulated data to the observed one. Indeed, it was observed that the performance of the model increased with the **complexity of the parameterization** (in terms of spatial and temporal distribution of the parameters).
9. Two **best management scenarios** have been analyzed by the SWAT and MOHID models, of which the first scenario has been based on the general crop extension tendency in the Alegria River watershed; and the second, on a common practice in pollution mitigation plans. The land use change scenario slightly decreased the N export and the nitrate

concentration in the aquifer, and, although in some cases is practically inappreciable, increased the cereal yields. The decrease in fertilization doses supposed a notable improvement with regard to nitrate pollution in the aquifer and N load export from the watershed, the agricultural production also decreased.

10. The fact of having obtained a good representation of the groundwater nitrate concentration trend at large temporal scale by a conceptual model **evidences the usefulness** of this kind of models in both the water ecosystem and the socio-economical environments.

6.2.2. Perspective work and recommendations

Hereinafter, I highlight the aspects in which it could go in depth in order to follow with the work presented in the current Thesis work, in terms of field work, modelization and the application of the models.

First of all, I think that more extensive field data would help better characterize the models, especially when working with the physics-based MOHID model, which simulated processes respond to the physical laws and the physical properties of the systems. We should keep in mind, though, that not all the parameters have the same influence on the simulated processes, as it was already demonstrated with the sensitivity analysis. In this sense, it is thought that an initial sensitivity analysis can help deciding which the most influential parameters are and so, which require special attention on the field. According to this work the spatial analyze of parameters such as θ_s , Kc or POC' could help define maps created by interpolation techniques which could be used as model inputs, which, in principle, should help obtain more accurate results. However, we have to be aware about the parameter heterogeneity on field and it has to be considered that the introduction of too detailed data to the model, could be also introducing more uncertainty. In any case, the objective of the study has to be carefully considered in order to evaluate the necessities of characterizing the model more or less minutely.

In the case of the SWAT model, being a conceptual model that simulates the processes according to empirical parameters, it is believed that the physical characterization of the model is not as important as for MOHID. Being in this case what most influences the results the technical ability of the modeler when it is being carried out the calibration process.

Additionally, there are other aspects which further study would be of real interest regarding the MOHID model. Concretely, they are aspects that are being developed at the moment by the team in charge of its development in the Maretec group in the Instituto Superior Técnico from Lisbon, which in the near future will be included in the code and ready to use. The modeling work carried out on this study, has demonstrated that the following aspects are of great importance when working with watershed scale models but are not yet included or corrected in the code:

- Implementation of the irrigation technique read as an HDF file.
- Implementation of the daily continuous fertilization technique.

- Implementation of the option of integrating results both in time series (e.g. N export through the channels) and HDF (e.g. evaporation).
- Implementation of a mass balance as already is for the water balance.
- Implementation of the mineralization process.
- Implementation of tools that allow working with HDF results (e.g. to obtain statistical data from HDF files).
- Correction of the N uptake method (the method which distinguishes the N uptake from the water uptake).
- Correction of the bugs in the water balance file.

In the same way, it is encouraged to the code developer team to update the documentation related to the new tools they release. The more accessible the use of MOHID model is, the more people and environmental organizations will employ it, with the subsequent publication of scientific papers and reports that will help the new model users.

The Sediment Quality module is one of the aspects of this code that needs more documentation and development. It is thought that it will be a useful tool to simulate all the soil processes derived by the microorganisms, but the lack of a user guide does not allow to working with it at the moment. In any case, after having shown the good performance of the denitrification simplification, instead of using the Sediment Quality module it would be interesting to implement the mineralization process and link all the carbon and nitrogen pools in order to have the possibility of simulating the turnover main processes by an approach more simple than that of the mentioned module.

With regard to the best management scenarios, this work can be used as a clear evidence of the utility of the numerical tools in environmental applications. It demonstrates how the models can be used to assess the impact of different management practices, helping quantify the impact on the pollution after they have been implemented and also estimate the time needed for changes are appreciated on the water quality.

If more field data were available, the impact of the practices could be evaluated at the plot scale by MOHID. Meanwhile, the created SWAT and MOHID models can be used as good indicators at larger scales, as the watershed scale. In fact, with the available data, it would be interesting to use them for future conditions simulation, in which, taking into account the climatic change, the effects of the BMPs could be assessed at larger temporal scales.

Finally, it is thought that considering the possibility of implementing a method for groundwater flow simulation by SWAT would greatly allow the extension of the possibilities given by this code. This could be carried out by both the implementation of new formulation to simulate groundwater flow (something that is currently being carried out by a research group in Ecolab) or the connection between SWAT and a groundwater physics-based model (as other authors have already done), from which the modelization could be benefited by the simulation of N cycle processes in the soil and the groundwater and nutrient flow through the aquifer.

ANEXO I

Parámetros del modelo MOHID

Atmosphere data file

OUTPUT_TIME : 0 86400
TIME_SERIE_LOCATION : ..\General Data\time series\TS_REC.dat
PREDICT_DT_METHOD : 2
RAIN_LIMITS : 10 600 20 60 100 6
IRRI_LIMITS : 1 100 5 10 10 5

<beginproperty>

NAME : precipitation
UNITS : mm
DESCRIPTION : precipitation
FILE_IN_TIME : TIMESERIE
!INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 2.0
FILENAME : ..\General Data\Boundary Conditions\alegria_prec_diario_10min_warmup1.srm
DATA_COLUMN : 2
REMAIN_CONSTANT : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 0
ACCUMULATE_VALUES : 1
!MIN_FOR_DT_DECREASE : 2.0
<endproperty>

<beginproperty>

NAME : solar radiation
UNITS : W/m2
DESCRIPTION : solar radiation
FILE_IN_TIME : TIMESERIE
FILENAME : ..\General Data\Boundary Conditions\solar_radiation.srm
DATA_COLUMN : 2
DEFAULTVALUE : 1000.
REMAIN_CONSTANT : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 0
<endproperty>

<beginproperty>

NAME : wind modulus
UNITS : m/s
DESCRIPTION : wind modulus
DEFAULTVALUE : 1.0
FILE_IN_TIME : TIMESERIE
FILENAME : ..\General Data\Boundary Conditions\wind_modulus.srm
DATA_COLUMN : 2
REMAIN_CONSTANT : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 0
<endproperty>

<beginproperty>

NAME : air temperature
UNITS : C
DESCRIPTION : air temperature
FILE_IN_TIME : TIMESERIE
!INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
FILENAME : ..\General Data\Boundary Conditions\air_temperature.srm
DATA_COLUMN : 2
DEFAULTVALUE : 20.0
REMAIN_CONSTANT : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 0
<endproperty>

```

<beginproperty>
NAME          : relative humidity
UNITS         : --
DESCRIPTION   : relative humidity
DEFAULTVALUE  : 0.7
FILE_IN_TIME  : TIMESERIE
FILENAME      : ..\General Data\Boundary Conditions\relative_humidity.srm
DATA_COLUMN   : 2
DEFAULTVALUE  : 20.0
REMAIN_CONSTANT : 0
REMAIN_CONSTANT : 0
TIME_SERIE    : 1
OUTPUT_HDF    : 0
<endproperty>

```

```

<beginproperty>
NAME          : cloud cover
UNITS         : fraction
DESCRIPTION   : cloud cover
DEFAULTVALUE  : 0.
REMAIN_CONSTANT : 1
TIME_SERIE    : 1
OUTPUT_HDF    : 0
<endproperty>

```

Basin data file

```

!Compute Options
ATMOSPHERE      : 1
EVAPOTRANSPIRATION : 1
EVAPOTRANSPIRATION_METHOD : 2
!(1-Global Evapotranspiration; 2-Transpiration and Evaporation)
EVAP_METHOD     : 1
!Evaporation from canopy and water column method 1 - latent heat method. 2 - uses potential evaporation 3 - no
evaporation from canopy and water column

POROUS_MEDIA     : 1
RUN_OFF          : 1
DRAINAGE_NET     : 1
VEGETATION       : 1
EVAP_FROM_CANOPY : 1
EVAP_FROM_WATER_COLUMN : 1
POROUS_MEDIA_PROPERTIES : 1
RUN_OFF_PROPERTIES : 1

!Start / Continuous Computation
CONTINUOUS       : 0
COMPUTE_WATER_BALANCE : 1
DT_DURING_RAIN   : 3600.

!Output Options
OUTPUT_TIME      : 0 86400
TIME_SERIE_LOCATION : ..\General Data\time series\TS_basin.dat
TIME_SERIE_LOCATION_BWB : ..\General Data\time series\TS_dipu complete with new points_SRB.dat
VERIFY_MASS      : 1
COMPUTE_WATER_BALANCE : 1
MONTHLY_FLOW     : 1

!Evapotranspiration property block
<beginproperty>
NAME          : reference evapotranspiration
UNITS         : mm/h

```

DESCRIPTION : fao evapotranspiration
DEFAULTVALUE : 0.0
REMAIN_CONSTANT : 0
<endproperty>

Basin Geometry data file

!Compute Options
TRESHOLD_AREA : 2000000
DELINEATE_BASIN : 1
OUTLET_I : 55
OUTLET_J : 24

Drainage Network data file

TIME_SERIE_LOCATION : ..\General Data\time series\NTS_GW2.dat
NETWORK_FILE : ..\General Data\Digital terrain\rec4Drainage network2.dnt

!Output Options
OUTPUT_TIME : 0 86400.
OUTPUT_HYDRO : 1

!Start / Continuous Computation
INITIAL_WATER_DEPTH : 0.0
CONTINUOUS : 0

!Compute Options
GLOBAL_MANNING : 0.07
MIN_WATER_DEPTH : 0.0001
DISCHARGES : 0
HYDRODYNAMIC_APROX : 3 !1 - KinematicWave. 2 - DiffusionWave. 3 - DynamicWave
DOWNSTREAM_BOUNDARY : 3 !0 - Dam. 1 - ZeroDepthGradient. 2 - CriticalDepth. 3 - ImposedWaterLevel. 4 - ImposedVelocity
DEFAULT_VALUE : 0 !Imposed downstream value
ALLOW_BACKWATER : 1
INTEGRATE_FLOW : 1
INTEGRATE_FLOW_DT : 86400
STABILIZE : 1
STABILIZE_FACTOR : 0.2
!STABILIZE_COEFFICIENT : 0.001
STABILIZE_MIN_FACTOR : 0.001
MIN_NODES_TO_RESTART : 3
MIN_ITERATIONS : 5
DT_FACTOR : 1.5
DT_SPLIT_FACTOR : 1.25
MAX_ITERATIONS : 30000
DT_CUT_FACTOR : 0.1
LIMIT_DT_COURANT : 0
MAX_COURANT : 0.1
LIMIT_DT_VARIATION : 1

<beginproperty>

NAME : nitrate
UNITS : mgN/l
DESCRIPTION : nitrate
ADVECTION_DIFFUSION : 1
DEFAULTVALUE : 0.0
ADVDIFF_MOLECULAR_DIFF_COEF : 0.0
ADVDIFF_METHOD_H : 1 !UpwindOrder1 = 1. UpwindOrder2 = 2. UpwindOrder3 = 3. P2_TVD = 4.
!CentralDif = 5. LeapFrog = 6

ADVDIFF_METHOD_V : 1 !UpwindOrder1 = 1. UpwindOrder2 = 2. UpwindOrder3 = 3. P2_TVD = 4.
!CentralDif = 5. LeapFrog = 6
OUTPUT_HDF : 1
TIME_SERIE : 1
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : ammonia
UNITS : mgN/L
DESCRIPTION : ammonia
PARTICULATE : 0
OLD : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 1. !3.49E+08
ADVDIFF_MOLECULAR_DIFF_COEF : 0.0
ADVECTION_DIFFUSION : 1
SOIL_QUALITY : 0
DTINTERVAL : 86400.
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : labile dissolved organic carbon
UNITS : mg/L
DESCRIPTION : DOC
PARTICULATE : 0
OLD : 0
MIN_VALUE : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0.1
ADVECTION_DIFFUSION : 1
ADVDIFF_MOLECULAR_DIFF_COEF : 0.0
SOIL_QUALITY : 0
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
<endproperty>

Geometry data file

MINIMUMDEPTH : 0.02
<begindomain>
ID : 1
TYPE : CARTESIAN TOP
LAYERS : 12
LAYERTHICKNESS : 4.9 2.25 1.75 1.5 1.25 1 1 0.5 0.2 0.2 0.2 0.1
<enddomain>

Model data file

START : 2008 1 28 0 0 0
END : 2008 12 28 0 0 0
DT : 10.
VARIABLEDT : 1
MAXDT : 3600.
GMTREFERENCE : 0
DT_PREDICTION_INTERVAL : 60

Porous Media data file

BOTTOM_FILE :..\General Data\Digital Terrain\Pruebas DTM\5-bottom comDTM_ND_modificado_ND.dat
TIME_SERIE_LOCATION :..\General Data\time series\TS_REC.dat
OUTPUT_TIME : 0 86400
LIMIT_EVAP_WATER_VEL : 1
LIMIT_EVAP_HEAD : 1
HEAD_LIMIT : -100
IGNORE_WATER_COLUMN_ON_EVAP : 0
IMPOSE_BOUNDARY_BOTTOM : 0
THETA_HYDRO_COEF : 0.995
START_WITH_FIELD : 1
COMPUTE_SOIL_FIELD : 1
CONDUCTIVITYFACE : 3
HORIZONTAL_K_FACTOR : 25.0
CUT_OFF_THETA_LOW : 1e-15
CUT_OFF_THETA_HIGH : 1e-15
GW_SAT_FACTOR : 0.995
STABILIZE : 1
STABILIZE_FACTOR : 0.2
STABILIZE_MIN_FACTOR : 0.01
STABILIZE_RESTART_FACTOR : 0.
MAX_ITERATIONS : 1000000
MIN_ITERATIONS : 1
CHECK_DEC_ONLY : 1
!DT_FACTOR : 1.25
DT_FACTOR_DOWN : 1.5
DT_FACTOR_UP : 1.25
DT_SPLIT_FACTOR : 2.00
DT_CUT_FACTOR : 0.000256

<beginwaterlevel>

NAME : waterlevel
INITIALIZATION_METHOD : ASCII_FILE
DEFAULTVALUE : 0
!REMAIN_CONSTANT : 0
FILENAME : ..\General Data\Initial conditions\piezolevel_enero2008comDTM_ND_modificado_ND-
iwdconstant.dat
<endwaterlevel>

<beginimpermeablefraction>

NAME : impermeablefraction
INITIALIZATION_METHOD : ASCII_FILE
!INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0
REMAIN_CONSTANT : 1
FILENAME : ..\General Data\Other\Impermeabilization\Impermeability.dat
<endimpermeablefraction>

!----- Hydraulic Soil Properties

!acuifero

<beginhorizon>

KLB : 1

KUB : 7

<beginproperty>

NAME : SoilID

DEFAULTVALUE : 2

!INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT

REMAIN_CONSTANT : 1

INITIALIZATION_METHOD : ASCII_FILE

FILENAME : ..\General data\other\porous media\aq_zonesmap_arrate_asmatua2.dat

<endproperty>

<beginproperty>

```

NAME          : Theta
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE   : 0.5
<endproperty>
<endhorizon>

<beginhorizon>
KLB           : 8
KUB           : 12
<beginproperty>
NAME          : SoilID
DEFAULTVALUE   : 2
!INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
REMAIN_CONSTANT : 1
INITIALIZATION_METHOD : ASCII_FILE
FILENAME      : ..\General data\other\porous media\Soil_map_def.dat
<endproperty>
<beginproperty>
NAME          : Theta
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE   : 0.5
<endproperty>
<endhorizon>

!SiCL
<beginsoiltype>
ID            : 1
THETA_S       : 0.4820
THETA_R       : 0.0901
N_FIT        : 1.5202
SAT_K         : 1.29e-6
ALPHA        : 0.84
L_FIT        : 0.50
THETA_CV_MIN  : 0.2844
THETA_CV_MAX  : 0.3791
<endsoiltype>
!L
<beginsoiltype>
ID            : 2
THETA_S       : 0.3991
THETA_R       : 0.0609
N_FIT        : 1.47
SAT_K         : 1.39e-6
ALPHA        : 1.11
L_FIT        : 0.50
THETA_CV_MIN  : 0.2844
THETA_CV_MAX  : 0.3791
<endsoiltype>
!SiL
<beginsoiltype>
ID            : 3
THETA_S       : 0.4387
THETA_R       : 0.0645
N_FIT        : 1.66
SAT_K         : 2.11e-6
ALPHA        : 0.51
L_FIT        : 0.50
THETA_CV_MIN  : 0.2844
THETA_CV_MAX  : 0.3791
<endsoiltype>
!CL
<beginsoiltype>
ID            : 4
THETA_S       : 0.4418

```

THETA_R : 0.0792
N_FIT : 1.4145
SAT_K : 9.47e-7
ALPHA : 1.58
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791
<endsoiltype>

<beginsoiltype>
ID : 5
THETA_S : 0.35
THETA_R : 0.0901
N_FIT : 1.5202
SAT_K : 1.29e-6
ALPHA : 0.84
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791
<endsoiltype>

!SiCL
<beginsoiltype>
ID : 6
THETA_S : 0.4820
THETA_R : 0.0901
N_FIT : 1.5202
SAT_K : 1.29e-5
ALPHA : 0.84
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791
<endsoiltype>

!L
<beginsoiltype>
ID : 7
THETA_S : 0.3991
THETA_R : 0.0609
N_FIT : 1.47
SAT_K : 1.39e-5
ALPHA : 1.11
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791
<endsoiltype>

!SiL
<beginsoiltype>
ID : 8
THETA_S : 0.4387
THETA_R : 0.0645
N_FIT : 1.66
SAT_K : 2.11e-5
ALPHA : 0.51
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791
<endsoiltype>

!CL
<beginsoiltype>
ID : 9
THETA_S : 0.4418
THETA_R : 0.0792
N_FIT : 1.4145
SAT_K : 9.47e-6

ALPHA : 1.58
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791
<endsoiltype>

!<beginsoiltype>
!ID : 10
!THETA_S : 0.35
!THETA_R : 0.0901
!N_FIT : 1.5202
!SAT_K : 1.29e-6
!ALPHA : 0.84
!L_FIT : 0.50
!THETA_CV_MIN : 0.2844
!THETA_CV_MAX : 0.3791
!<endsoiltype>

<beginsoiltype>
ID : 10
THETA_S : 0.35
THETA_R : 0.0901
N_FIT : 1.5202
SAT_K : 2.7e-4
ALPHA : 0.84
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791
<endsoiltype>

<beginsoiltype>
ID : 11
THETA_S : 0.35
THETA_R : 0.0901
N_FIT : 1.5202
SAT_K : 2.75e-4
ALPHA : 0.84
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791
<endsoiltype>

<beginsoiltype>
ID : 12
THETA_S : 0.35
THETA_R : 0.0901
N_FIT : 1.5202
SAT_K : 2.9e-4
ALPHA : 0.84
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791
<endsoiltype>

<beginsoiltype>
ID : 13
THETA_S : 0.35
THETA_R : 0.0901
N_FIT : 1.5202
SAT_K : 7.9e-5
ALPHA : 0.84
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791

<endsoiltype>

<beginsoiltype>

ID : 14
THETA_S : 0.35
THETA_R : 0.0901
N_FIT : 1.5202
SAT_K : 1.1e-4
ALPHA : 0.84
L_FIT : 0.50
THETA_CV_MIN : 0.2844
THETA_CV_MAX : 0.3791

<endsoiltype>

Porous Media Properties data file

!Output Options

OUTPUT_TIME : 0 86400
TIME_SERIE_LOCATION : ..\General Data\time series\TS_REC4.dat

!Compute Options

ADVDIFF_EXPLICIT : 1 !(1 - adv diff explicit; 0 - vertical adv diff is implicit. horizontal remains explicit)
ADVDIFF_ADVECTION_H_IMP_EXP : 1 !(read if ADVDIFF_EXPLICIT : 0; 0 - horizontal adv implicit; 1 - horizontal adv explicit)
NEW_FORMULATION : 1
!he probado con 0y1

<begin_dispersion_long>

NAME : dispersion long
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0.0 !0.1
REMAIN_CONSTANT : 1
<end_dispersion_long>

<begin_dispersion_trans>

NAME : dispersion trans
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0.0 !0.1 !0.3
REMAIN_CONSTANT : 1
<end_dispersion_trans>

<beginproperty>

NAME : nitrate
UNITS : mgN/l
DESCRIPTION : nitrate
ADVECTION_DIFFUSION : 1
DEFAULTVALUE : 12.0
MIN_VALUE : 0.
ADVDIFF_MOLECULAR_DIFF_COEF : 0.0
ADVDIFF_METHOD_H : 1 !UpwindOrder1 = 1. UpwindOrder2 = 2. UpwindOrder3 = 3. P2_TVD = 4.
!CentralDif = 5. LeapFrog = 6
ADVDIFF_METHOD_V : 1 !UpwindOrder1 = 1. UpwindOrder2 = 2. UpwindOrder3 = 3. P2_TVD = 4.
!CentralDif = 5. LeapFrog = 6
OUTPUT_HDF : 1
TIME_SERIE : 1
DECAY : 1
DECAY_EQUATION : 1
DECAY_HALF_SATURATION : 1
OUTPUT_AVERAGE_CONC : 1
<endproperty>

<beginproperty>

NAME : particulated refractory organic carbon

UNITS : mg/kgsoil
DESCRIPTION : PROC
PARTICULATE : 0
OLD : 0
MIN_VALUE : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : PROFILE
FILENAME : ..\General Data\Other\Porous media\Profiles\POC.dat
DEFAULTVALUE : 1086.237852
MIN_VALUE : 0.
ADVECTION_DIFFUSION : 0
DTINTERVAL : 86400.
SOIL_QUALITY : 0
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : particulate organic carbon
UNITS : mg/kgsoil
DESCRIPTION : POC
PARTICULATE : 0
OLD : 0
MIN_VALUE : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : PROFILE
FILENAME : ..\General Data\Other\Porous media\Profiles\POC_soils_half.dat
DEFAULTVALUE : 1086.237852
MIN_VALUE : 0.
ADVECTION_DIFFUSION : 0
DTINTERVAL : 86400.
SOIL_QUALITY : 0
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
DECAY : 1
DECAY_RATE : 0.0001
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : labile dissolved organic carbon
UNITS : mg/L
DESCRIPTION : DOC
PARTICULATE : 0
OLD : 0
MIN_VALUE : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 4.5
ADVECTION_DIFFUSION : 1
ADVDIFF_MOLECULAR_DIFF_COEF : 0.0
SOIL_QUALITY : 0
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
DECAY : 1
DECAY_RATE : 0.00001
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : particulated refractory organic nitrogen
UNITS : mg/kgsoil
DESCRIPTION : PRON

PARTICULATE : 0
OLD : 0
MIN_VALUE : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 88.1660298
MIN_VALUE : 0.
ADVECTION_DIFFUSION : 0
DTINTERVAL : 86400.
SOIL_QUALITY : 0
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : particulate organic nitrogen
UNITS : mg/kgsoil
DESCRIPTION : PLON
PARTICULATE : 0
OLD : 0
MIN_VALUE : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 19.05680443
MIN_VALUE : 0.
ADVECTION_DIFFUSION : 0
DTINTERVAL : 86400.
SOIL_QUALITY : 0
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : ammonia
UNITS : mgN/L
DESCRIPTION : ammonia
PARTICULATE : 0
OLD : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 1. !3.49E+08
MIN_VALUE : 0.
ADVDIFF_MOLECULAR_DIFF_COEF : 0.0
ADVECTION_DIFFUSION : 1
SOIL_QUALITY : 0
DTINTERVAL : 86400.
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : soil dry density
UNITS : kg/m3cell
DESCRIPTION : soil dry density
PARTICULATE : 0
OLD : 0
MIN_VALUE : 0
FILE_IN_TIME : NONE
!INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
INITIALIZATION_METHOD : LAYERS
LAYERS_VALUES : 1600 1600 1600 1600 1600 1600 1600 1600 1270 1270 1270 1270 1270

DEFAULTVALUE : 1490.
ADVECTION_DIFFUSION : 0
SOIL_QUALITY : 0
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
<endproperty>

RunOff data file

TIME_SERIE_LOCATION : ..\General Data\time series\TS_REC.dat
!!Output Options
!OUTPUT_TIME : 0 86400.
!!Start / Continuous Computation
!Output Options
OUTPUT_TIME : 3600. 3600.

!Start / Continuous Computation
CONTINUOUS : 0

!Compute Options
HYDRODYNAMIC_APROX : 3
MIN_WATER_COLUMN : 0.0001
DISCHARGES : 0
IMPOSE_BOUNDARY_VALUE : 0
BOUNDARY_VALUE : 0
SIMPLE_CHANNEL_FLOW : 1
ROUTE_D4 : 0
ROUTE_D4_ON_DN : 1
WRITE_MAX_FLOW_FILE : 1
WRITE_MAX_WATER_COLUMN : 1
!CHANNEL_LINK_METHOD : 4
STABILIZE : 1
STABILIZE_FACTOR : 0.05
STABILIZE_MIN_WATER_COLUMN : 0.0001
STABILIZE_RESTART_FACTOR : 0.
MAX_ITERATIONS : 100000
MIN_ITERATIONS : 1
CHECK_DEC_ONLY : 1
DT_FACTOR : 1.5
!DT_FACTOR_DOWN : 2.00
!DT_FACTOR_UP : 1.25
DT_SPLIT_FACTOR : 1.25
DT_CUT_FACTOR : 0.0001
LIMIT_DT_COURANT : 0
!MAX_COURANT : 0.5

!Overland Manning Block
<BeginOverLandCoefficient>
FILE_IN_TIME : NONE
!INITIALIZATION_METHOD : ASCII_FILE
DEFAULTVALUE : 0.07
REMAIN_CONSTANT : 1
!FILENAME : ..\General Data\Others\run off\grid data manning runoff.dat
<EndOverLandCoefficient>

<BeginInitialWaterColumn>
NAME : initial water column
DEFAULTVALUE : 0
REMAIN_CONSTANT : 1
<EndInitialWaterColumn>

Runoff Properties data file

!Output Options

OUTPUT_TIME : 0 86400
TIME_SERIE_LOCATION : ..\General Data\time series\TS_REC.dat

!Compute Options

ADVDIFF_EXPLICIT : 1 (1 - adv explicit; 0 - adv implicit; diff always explicit)
NEW_FORMULATION : 1

<begin_dispersion_trans>

NAME : dispersion trans
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0.0 !10. !0.1 !0.3
REMAIN_CONSTANT : 1
<end_dispersion_trans>

<beginproperty>

NAME : nitrate
UNITS : mg/l
DESCRIPTION : nitrate in runoff
PARTICULATE : 0
ADVECTION_DIFFUSION : 1
ADVDIFF_METHOD_H : 1 !UpwindOrder1 = 1. UpwindOrder2 = 2. UpwindOrder3 = 3. P2_TVD = 4.
CentralDif = 5. LeapFrog = 6
DEFAULTVALUE : 0.
ADVDIFF_MOLECULAR_DIFF_COEF : 0.0 ! 1.15741E-8
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
SOIL_CHEMISTRY : 0
<endproperty>

<beginproperty>

NAME : ammonia
UNITS : mgN/L
DESCRIPTION : ammonia
PARTICULATE : 0
OLD : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 1. !3.49E+08
ADVDIFF_MOLECULAR_DIFF_COEF : 0.0
ADVECTION_DIFFUSION : 1
SOIL_QUALITY : 0
DTINTERVAL : 86400.
SOIL_CHEMISTRY : 0
TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
<endproperty>

<beginproperty>

NAME : labile dissolved organic carbon
UNITS : mg/L
DESCRIPTION : DOC
PARTICULATE : 0
OLD : 0
MIN_VALUE : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0.1
ADVECTION_DIFFUSION : 1
ADVDIFF_MOLECULAR_DIFF_COEF : 0.0
SOIL_QUALITY : 0
SOIL_CHEMISTRY : 0

TIME_SERIE : 1
OUTPUT_HDF : 1
<endproperty>

Vegetation data file

!LandUse/Agricultural Practices definition

<begin_AgriculturalPractices>

FILE_IN_TIME : HDF
!INITIALIZATION_METHOD : ASCII_FILE
!INITIALIZATION_METHOD : TIMESERIE
HDF_FIELD_NAME : AgricPractID
FILENAME : ..\General Data\Other\Vegetation\springcrop\AgricPractID.hdf5
DEFAULTVALUE : 3
REMAIN_CONSTANT : 0
<end_AgriculturalPractices>

TIME_SERIE_LOCATION : ..\General Data\Time series\TS_REC2.dat
OUTPUT_TIME : 0. 864000.
MODEL_EVOLUTION : 2

!Databases needed

PARAMETERS_FILE : ..\General Data\Other\Vegetation\VegetationParameters_proba_MINEsemanal1.dat
FEDDES_DATABASE : ..\General Data\Other\Vegetation\MyFeddesDatabase2.dat
GROWTH_DATABASE : ..\General Data\Other\Vegetation\GrowthDatabase_SWAT.dat
FERTILIZER_DATABASE : ..\General Data\Other\Vegetation\MyFertilizer database_sinNH4.dat

VEGETATION_DT : 86400.
INTEGRATION_DT : 600. !hourly meteorology data

!Plant stresses

WATER_STRESS : 1
NITROGEN_STRESS : 1
PHOSPHORUS_STRESS : 0
TEMPERATURE_STRESS : 1
ADJUST_RUE_FOR_CO2 : 0
ADJUST_RUE_FOR_VPD : 1

GRAZING : 0
HARVEST_KILL : 1
DORMANCY : 0
FERTILIZATION : 1
NUTRIENT_FLUXES_WITH_SOIL : 1
FLUXES_TO_SOIL_OUTPUT : 1

!Computation methods

WATER_UPTAKE_METHOD : 1
!1- according to root profile (feddes); 2-SWAT based (exponential and thresholds)
ROOT_PROFILE : 1
!1- triangular; 2- Constant; 3-Exponential (only read if WATER_UPTAKE_METHOD : 1)
WATER_UPTAKE_STRESS_METHOD : 1 !1-Feddes
!1-Feddes; 2- VanGenuchten (only read if WATER_UPTAKE_METHOD : 1)
NUTRIENT_UPTAKE_METHOD : 2

!Potential total HU (yearly HU) - $\text{SUM}_{i=1\text{to}12}(\text{average monthly temperature in month } i * \text{days in month } i)$

<begin_TotalPotentialHU>
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 5475.
REMAIN_CONSTANT : 1
<end_TotalPotentialHU>

!Property declaration

<beginproperty>
NAME : total plant biomass
UNITS : kg/ha
DESCRIPTION : plant biomass
EVOLUTION : 2
OLD : 0
DEFAULTVALUE : 0.
REMAIN_CONSTANT : 0
OUTPUT_HDF : 0
TIME_SERIE : 1
BOX_TIME_SERIE : 0
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : total plant nitrogen
UNITS : kg/ha
DESCRIPTION : plant nitrogen content
EVOLUTION : 2
OLD : 0
DEFAULTVALUE : 0.
REMAIN_CONSTANT : 0
OUTPUT_HDF : 0
TIME_SERIE : 1
BOX_TIME_SERIE : 0
<endproperty>

!<beginproperty>
NAME : total plant phosphorus
UNITS : kg/ha
DESCRIPTION : plant phosphorus content
EVOLUTION : 2
OLD : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0.
REMAIN_CONSTANT : 0
OUTPUT_HDF : 0
TIME_SERIE : 1
BOX_TIME_SERIE : 0
!<endproperty>

<beginproperty>
NAME : root biomass
UNITS : kg/ha
DESCRIPTION : plant root biomass
EVOLUTION : 2
OLD : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0.
REMAIN_CONSTANT : 0
OUTPUT_HDF : 0
TIME_SERIE : 1
BOX_TIME_SERIE : 0
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : root depth
UNITS : m
DESCRIPTION : plant root depth
EVOLUTION : 2
OLD : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT

DEFAULTVALUE : 0.0
REMAIN_CONSTANT : 0
OUTPUT_HDF : 0
TIME_SERIE : 1
BOX_TIME_SERIE : 0
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : leaf area index
UNITS : m2/m2
DESCRIPTION : plant leaf area index
EVOLUTION : 2
OLD : 0
FILE_IN_TIME : NONE
DEFAULTVALUE : 0.
REMAIN_CONSTANT : 0
OUTPUT_HDF : 0
TIME_SERIE : 1
BOX_TIME_SERIE : 0
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : canopy height
UNITS : m
DESCRIPTION : plant canopy height
EVOLUTION : 2
OLD : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0.
REMAIN_CONSTANT : 0
OUTPUT_HDF : 0
TIME_SERIE : 1
BOX_TIME_SERIE : 0
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : specific leaf storage
UNITS : m3/m2
DESCRIPTION : plant specific leaf storage
EVOLUTION : 1
OLD : 0
FILE_IN_TIME : NONE
INITIALIZATION_METHOD : CONSTANT
DEFAULTVALUE : 0.0001
REMAIN_CONSTANT : 1
OUTPUT_HDF : 0
TIME_SERIE : 1
BOX_TIME_SERIE : 0
<endproperty>

<beginproperty>
NAME : crop coefficient
FILE_IN_TIME : HDF
!INITIALIZATION_METHOD : ASCII_FILE
!INITIALIZATION_METHOD : TIMESERIE
EVOLUTION : 1
OLD : 0
HDF_FIELD_NAME : EVTPCropCoefficient
FILENAME : ..\General Data\Other\Vegetation\springcrop\EVTPCropCoefficient.hdf5
DEFAULTVALUE : 3
REMAIN_CONSTANT : 0
TIME_SERIE : 1
<endproperty>

ANEXO II

Publication: "Application of SWAT model to assess the impact of agricultural management practices changes in water quality"

Application of the SWAT model to assess the impact of changes in agricultural management practices on water quality

A. M. Epelde¹, I. Cerro¹, J. M. Sánchez-Pérez^{2,3}, S. Sauvage^{2,3}, R. Srinivasan⁴ and I. Antigüedad¹

¹*Department of Geodynamics, Hydrology and Environment Group. University of the Basque Country, Leioa, Basque Country, Spain*
anemiren.epelde@ehu.es

²*INPT, Laboratoire Ecologie Fonctionnelle et Environnement (EcoLab), University of Toulouse, F-31326 Castanet Tolosan Cedex, France*

³*CNRS, EcoLab, F-31326 Castanet Tolosan Cedex, France*

⁴*Department Ecosystem Science & Management, Department Biological & Agricultural Engineering, Texas A&M University, College Station, Texas USA*

Received 26 October 2013; accepted 9 September 2014

Editor Z.W. Kundzewicz; Guest editor V. Krysanova

Abstract An excessive use of nitrogen in agricultural regions leads to nitrate pollution of surface and ground-water systems. The Alegria River watershed (Basque Country, northern Spain) is an agricultural area dominated by a Quaternary shallow aquifer that has suffered nitrate-related problems since the 1990s. Our objective was to use the SWAT hydrological water quality model for long-term backward simulation (1990–2011) considering main changes in management practices to determine their impact on water quality. Hydrology, crop yield, nitrogen losses and soil nitrogen budgets were simulated satisfactorily. Nitrogen budgets indicated that annual N inputs exceed outputs (which consider main N loss pathways), resulting in mean N surpluses of 114 and 65 kg ha⁻¹ year⁻¹ in the periods 1990–1999 and 2000–2011, respectively. In the long-term, trends in N surplus generally follow those of fertilization input, which directly affect groundwater nitrate concentration. The characteristics of the aquifer and non-point source pollution have enabled us to properly simulate the historical trends in N concentration in the Vitoria-Gasteiz aquifer.

Key words SWAT; soil N budget; nitrogen losses; agricultural practices; long-term simulation; nitrates

Application du modèle SWAT à l'évaluation de l'impact des modifications des pratiques agricoles sur la qualité de l'eau

Resumé Une utilisation excessive de l'azote dans les régions agricoles conduit à la pollution par les nitrates des eaux superficielles et souterraines. Le bassin versant de la rivière Alegria (Pays Basque, Nord de l'Espagne) est une zone agricole dont l'aquifère quaternaire peu profond souffre depuis les années 1990 de ce type de problème. Notre objectif a été d'utiliser le modèle hydrologique de qualité de l'eau SWAT pour simuler l'historique de cette pollution (1990–2011), en prenant en compte les principaux changements de pratiques culturales, afin de déterminer l'impact de ces modifications sur la qualité de l'eau. L'hydrologie, les rendements agricoles, les pertes d'azote et les bilans d'azote du sol ont été simulés de manière satisfaisante. Les bilans d'azote ont indiqué que les apports annuels de N dépassaient les sorties (qui sont considérées comme les principales sources de pertes). Le résultat est un excédent moyen de 114 kg ha⁻¹ an⁻¹ pour la période 1990–1999 et de 65 pour la période 2000–2011. Les tendances à long terme des excédents d'azote sont en accord avec les apports de fertilisants, qui affectent directement la concentration en nitrates des eaux souterraines. A partir des caractéristiques de l'aquifère et des apports diffus de pollution d'origine agricole, il a donc été possible de simuler correctement l'évolution à long terme des teneurs en azote de l'aquifère Vitoria-Gasteiz.

Mots clefs SWAT ; bilan de N du sol ; pertes d'azote ; pratiques agricoles ; simulation à long terme ; nitrates

1 INTRODUCTION

In regions with intense agricultural management, surface water and groundwater are usually affected by

anthropogenic pollution resulting from the use of high doses of pesticides and fertilizers and inadequate irrigation techniques. Although in such regions nitrate leaching seems to be an inevitable process,

an improvement in management practices leading to a higher N fertilizer use efficiency is thought to reduce the potential for nitrate contamination of groundwater (Bijay-Singh and Sekhon 1995). Nowadays, particular attention is being focused on groundwater quality, especially in regions where it is the main source of drinking water. Current regulations, such as the European Water Framework Directive (EC 2000), recognize and attempt to address this problem. In fact, there are several hazards related to nitrate pollution of waters, from health hazards linked to consumption of nitrate-bearing water, to the proliferation of toxic algae and hypoxia (Exner et al. 2010).

The environmental impact of agricultural practices depends on many different factors, such as crop type, hydrometeorological conditions (climatology and hydrogeology), crop management practices and soil characteristics (Jégo et al. 2008). Several authors have demonstrated the effect of different land covers on the hydrology of watersheds (Pikounis et al. 2003), a factor that is also directly linked to the nutrient transport within a watershed, especially within the root zone. In lowland watersheds where the water table is quite shallow, groundwater transport plays a key role in the transport of pollutants from the soils into the water system (Wriedt and Rode 2006) and, particularly during flood events, streams are at risk of contamination due to the close connection between them and the aquifer (Cerro et al. 2014a).

The Alegria River watershed (Basque Country, northern Spain) is a lowland area with extensive agricultural land use. It is dominated by a Quaternary aquifer with a quite shallow groundwater table, making this watershed especially vulnerable to groundwater pollution (Schmalz et al. 2007, Lam et al. 2011). Almost the whole study area was designated as a Vulnerable Zone for nitrate pollution from agricultural sources at the end of the 1990s, in line with the European Directive (EC 1991). With the aim of reducing the pollution, various measures were taken, including the establishment of a Code of Good Practices and changes in the origin of irrigation water. These measures led to a decrease in groundwater N concentration and, in turn, a decrease in the N concentration in the river. It should also be noted, though, that groundwater concentration has a slow response to fertilizer applied (Exner et al. 2010) and, hence, the decrease in N input to the system was appreciated some time after regulations were introduced. Nowadays, the limit value for nitrates

(50 mg L⁻¹ according to the European Directive) is exceeded at some points in the aquifer but rarely in the river (Cerro 2013).

Due to the multiple processes involved in the dynamics of pesticides and fertilizers, modelling is considered extremely valuable as it can help to quantify the pollution, making balances at the scale of the watershed and guiding decisions to improve management (Jégo et al. 2008, Cerro et al. 2014a). In this study, the SWAT model (Soil and Water Assessment Tool) was used, being considered one of the most useful models for long-term simulation in predominantly agricultural watersheds (Borah and Bera 2003), and robust in predicting nutrient losses at the watershed scale (Gassman et al. 2007, Ferrant et al. 2011, Cerro et al. 2014a).

There are many studies on nitrate pollution of agricultural watersheds that have been carried out with the SWAT model. They are usually focused on pollution mitigation scenarios by changes in land use (Wang et al. 2008, Ferrant et al. 2013), fertilization doses (Ferrant et al. 2013, Liu et al. 2013, Boithias et al. 2014, Cerro et al. 2014b) and other management practices, such as the burial of straw, tillage intensity or fertilization dosage (Ferrant et al. 2013, Liu et al. 2013, Cerro et al. 2014b) by applying a previously calibrated and validated model. Although some studies consider varying conditions on agricultural management obtained from interpolation (Bracmort et al. 2006) or from tools like Land Use Update and Soil Assessment (Koch et al. 2012), most of the studies analyse the effect of alternative scenarios implemented all at once. In any case, calibration and validation of the model are usually performed before the implementation of the scenarios of interest. In this study, however, we simulate varying management practices since the year 1986. Although we calibrate and validate the model for a period in which there is plenty of available field data, we also carry out a validation of other two previous periods, which we consider necessary as the results obtained during them is significant for the conclusion of this work.

The main objectives of this study were to: (a) test how well the SWAT model connects nutrient surpluses and groundwater pollution with the river, (b) perform a long-term (1990–2011) simulation taking into account various changes in agricultural practices to see how nutrient dynamic was affected over the study period; and (c) assess how well the model simulates the nitrate concentration within the aquifer. The fact that the study period was when important

agricultural management changes were registered helps us to identify the aspects which most influence water quality. These aspects should be carefully regarded in the future when new agricultural management legislation is being implemented.

2 MATERIALS AND METHODS

2.1 Study area

The Alegria River watershed (Fig. 1) is a sub-basin (115 km²) of the Ebro River basin and it is located in the Basque Country (northern Spain). The underlying materials in the lowland are Quaternary fluvial and alluvial deposits (a Quaternary aquifer) lying over impermeable marls. The average thickness of the Quaternary formation is 5 m. The elevation of the watershed ranges from 506 to 1098 m a.s.l., with a mean of 613 m a.s.l. The average annual precipitation is 650 mm and seasonal variability is significant. Autumn is the rainiest season, registering around 30% of the annual precipitation. High temperature variability is observed on both annual and daily scales (daily means ranging from 0 to 25°C, with changes within a day by as much as 20°C). River discharge was measured at the outlet of the study area. The average discharge in Alegria River for the period 2009–2011 was 0.32 m³ s⁻¹, the annual mean water outflow being 11 hm³. Observed minimum and maximum discharges were 0.02 and 9.55 m³ s⁻¹, respectively. The water of the upper part of the

Table 1 Land-use classification in the Alegria River watershed.

Land-use type	Area (km ²)	Area (%)
Pasture	3.5	6.6
Deciduous forest	9.2	17.2
Agricultural land	37.1	69.4
Water	0.4	0.8
Urban	3.2	6
	53.4	100

watershed is routed to a reservoir outside the watershed through the Alegria channel (Fig. 1). This study is focused on the area downstream of the channel (53 km²) as the channel is believed to route all the surface water from the upper part. The alluvial land is characterized by high clay content soils, resulting in a high water retention capacity, a property that makes them suitable for cultivation (Cerro 2013). Approximately 70% of the studied area is in agricultural use, the remaining part being covered by forest and pastures (Table 1). The main crops in the area are rainfed grains (wheat, oats and barley) and irrigated sugar beet and potato.

2.2 SWAT model description

The SWAT model is a semi-distributed basin-scale model developed by the United States Department of Agriculture (USDA). In this study we used the ArcSWAT interface (ArcSWAT Version 2009.93.7 b)

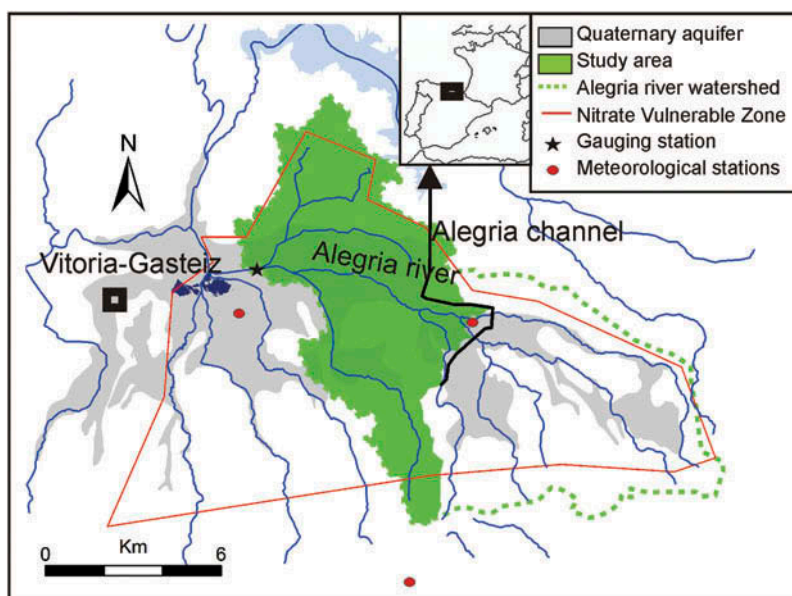


Fig. 1 Location of the study area and positions of gauging and meteorological stations in the Alegria River watershed.

for ArcGIS (Winchell *et al.* 2007). The SWAT model can predict long-term impacts of land use and agricultural management on water (Arnold *et al.* 1998). It is process-based, operates at daily and monthly time steps, and it includes hydrological, chemical, ecological and management practices modules.

The SWAT model divides the watershed into sub-basins connected by a stream network, and further delineates each sub-basin into hydrologic response units (HRUs), which consist of unique combinations of land cover, slope and soil type. SWAT simulates each HRU separately and calculates daily water balances. It is assumed that there is no interaction between HRUs (Srinivasan *et al.* 2010). The model considers multiple hydrological processes occurring in the soil: infiltration, evapotranspiration, percolation into a deeper aquifer and water losses by runoff, as well as lateral and groundwater flow. It also simulates N transport and transformation at HRU scale considering the basic processes of denitrification, volatilization and plant uptake. SWAT distinguishes five different pools for mineral and organic N. Channel water routing can be calculated with different variations of the kinematic wave model. SWAT uses Manning's equation to define the rate and velocity of flow. The water balance components within the reach segment and, in turn, the outflow to the next reach are calculated considering all the losses (via evaporation, transmission, return flow from bank storage and diversions). It is also possible to model nutrient transformations within the channel network. More detailed information about the SWAT model can be found in Neitsch *et al.* (2011).

The SWAT model has been widely calibrated and validated through the comparison of observed and simulated streamflow data, as well as nutrient and sediment loads at watershed outlets. However, publications related to the vegetation growth module are not so abundant (Nair *et al.* 2011), despite the fact that its proper calibration is considered an essential factor for good performance of the model. The importance of the correct simulation of vegetation growth lies in its influence on water and nutrient balances of a system, especially for agricultural watersheds. The SWAT model's crop growth module is based on the Erosion/Productivity Impact Calculator model (EPIC; Williams *et al.* 1989).

2.3 Input data for SWAT

The main inputs for the SWAT model are meteorological data, elevation, soil and land-use maps.

Meteorological data used were obtained from the Basque Meteorology Agency (Euskalmet) and consist of precipitation, temperature, wind, solar radiation and humidity from three meteorological stations: two (Alegria-C056 and Arkaute-C001) located within the watershed at elevations below 550 m, and the third (Kapildui-C047) at a site about 2 km to the south at an elevation of 1173 m (Fig. 1). We believe that it is useful to consider meteorological information from this station located outside of the watershed due to the differences in its data (overall, higher precipitation and lower temperatures) compared to those from the other stations. The digital elevation model (LIDAR 2008, 5 × 5 m) was obtained from the Geoeuskadi website (www.geo.euskadi.net). For each soil represented in the soil map (Iñiguez *et al.* 1980), an average texture classification was obtained from the data developed by the Corporation of the Basque Government for the Rural and Marine Environment (HAZI) (Table 2). The most dominant soil types in the area are vertisol, cambisol and rendzina, and their general texture has been classified as a combination of loam, silty loam and clay loam, respectively. Aquifer material is characterized by a higher sand content and higher saturated conductivity (Table 2). The bulk density (BD), available water content (AWC) and saturated conductivity (Ksat) values were obtained from the Soil Water Characteristics Program developed by the USDA (Saxton and Rawls 2009). From the data provided by the Basque Institute for Agricultural Research and Development (Neiker-Tecnalia), organic carbon content (OC) was estimated to be 0.5% for all soil classes. According to the input data, the watershed was discretized into 66

Table 2 Soil classes and main characteristics.

Soil type	Layer depth (mm)	Clay (%)	BD (g/cm ³)	AWC (vol %)	Ksat (mm/h)	OC (%)
ROocl	1000	29	1.35	0.17	7.25	0.5
ROCCrc	2000	29	1.35	0.17	7.24	0.5
CCcvrc	2000	33	1.35	0.16	5.66	0.5
VCV (1)	1000	25	1.41	0.15	9.84	0.5
VCV (2)	4000	14	1.41	0.17	21.36	0.5
Ccrorc	2000	25	1.38	0.17	9.37	0.5
CCvc	2000	23	1.43	0.14	11.93	0.5
CV	1000	16	1.45	0.13	23.36	0.5
Lulro	500	30	1.39	0.15	6.61	0.5

ROocl: Ochric Rendzina; ROCCrc: Ochric Rendzina with Calcic Cambisol; CCcvrc, Ccrorc, CCcv: Calcic Cambisols; VCV: Vertisol with Vertic Cambisol (1 and 2, top and bottom layers, respectively); CCvc: Calcic Cambisol with Vertic Cambisol, CV: Vertic Cambisol; and, Lulro: Ortice Luvisol.

sub-basins and divided into 590 HRUs, created from the combination of three slope classes (0–5, 5–15 and >15%), eight soil types and 17 land uses. The land-use, soil and slope thresholds used for the HRU delineation was 3 ha for all the cases.

In the Alegria River watershed, the majority of the land was devoted to non-irrigated agriculture until the 1950s, but irrigated agriculture had become the dominant practice by the 1990s. Arrate *et al.* (1997) documented that, during this decade, the area occupied by non-irrigated crops was just 15% of that occupied by irrigated crops. However, by the end of the 1990s, the trend had reversed, with the non-irrigated cropland being more abundant than the irrigated land, a pattern that has remained until the present day.

To simulate this variability, areas of irrigated and non-irrigated crops were changed progressively. For the first years of the simulation, irrigated crops were set to occupy most of the arable lands, and the pattern changed through the mid-1990s until the year 2000, since when the distribution has been constant, with non-irrigated crops across the larger part of the arable land. In order to simplify the implementation of the model, from the 17 different land uses, the two covering the smallest areas were gathered into a single category of ‘other dominant crops’. Then, regular crop rotations and specific management practices for each crop category (Table 3) were established, based on land cover data acquired from Neiker-Tecnalia. Crop rotation and management data are essential aspects of this modelling for obtaining accurate estimations of water and crop yields (Srinivasan *et al.* 2010). In this study, the following crop rotations were considered:

- Rotation between non-irrigated crops (wheat/barley)
- Rotation between irrigated and non-irrigated crops (barley/sugar beet/wheat, barley/potato/wheat and sugar beet/wheat).

Table 3 Crop cycles and management practices.

Crop	Cycle	Tillage	Fertilization
Wheat	2 Nov.–31 Jul.	25 Oct.	25 Jan. (15-15-15) 5 Apr. (Nac 27%)
Winter barley	2 Nov.–31 Jul.	25 Oct.	5 Feb. (15-15-15) 5 Apr. (Nac 27%)
Spring barley	5 Feb.–31 Jul.	1 Feb.	25 Feb. (15-15-15) 5 Apr. (Nac 27%)
Sugar beet	15 Feb.–1 Nov.	10 Feb.	10 Feb. (8-15-15) 5 May (Nac 27%)
Potato	20 Apr.–20 Oct.	15 Apr.	15 Mar. (7-10-20) 20 May (Nac 27%)

Nac: Nitric ammoniacal fertilizer.

To interpret the results, the study period was divided into two periods (1990–1999 and 2000–2011) representing different agricultural practices. Specifically, the cut-off year 2000 was established in line with the implementation of the Code of Good Practices, which led to a drop in fertilizer use and a change in the origin of the irrigation water. From the data provided by Neiker-Tecnalia, annual fertilizer input was estimated to be approximately 960 and 680 t year⁻¹ for the first and second periods of the simulation, respectively.

Figure 2 represents the simulated amounts of top and dressing fertilizer applications. Note the decrease in fertilization over the periods, reflecting the real data. The secondary *x*- and *y*-axes represent the estimated nitrate concentration for irrigation water up to the year 2000. In previous decades, pumping water for irrigation was a common practice, a process that led to recirculation of the nitrate from the aquifer. After the implementation of the Code of Good Practices, however, farmers started taking the water from ponds not connected to the aquifer. As the SWAT model does not consider NO₃ concentration in irrigation water, the corresponding N load was calculated for 10 mm of water (each irrigation dose)

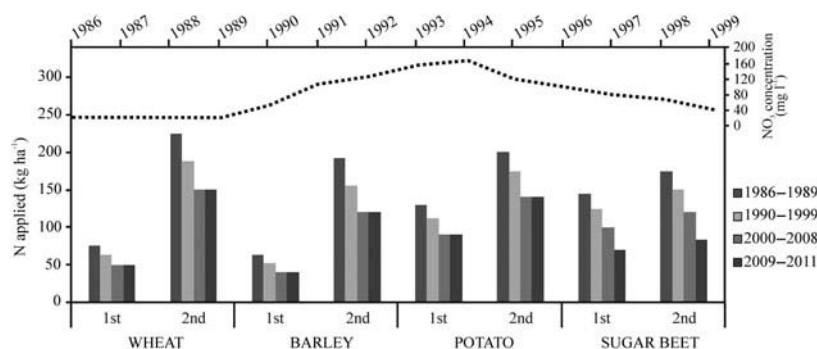


Fig. 2 Evolution of top (first) and dressing (second) fertilization (kg N ha⁻¹) during the simulated period. Nitrate concentration considered in irrigation water is shown on the secondary *y*-axis.

based on the annual groundwater nitrate measurements. The calculated value was applied simultaneously with each irrigation dose as mineral N fertilizer. This annual groundwater concentration dataset was taken from the Groundwater Control Network website of the Water Agency of the Basque Country (www.telur.es/redbas).

Irrigated crops (sugar beet and potato) receive, respectively, about 100 and 120 mm of water a year. So, depending on the annual NO_3 concentration of the groundwater, N added with irrigation water is equivalent to fertilization doses ranging between 4.5 and 37.8 $\text{kg ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$ for sugar beet areas, and between 5.4 and 45.4 $\text{kg ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$ for potato fields. Due to the large extent of irrigated crops areas, especially in the first years of the simulation, a detailed irrigation schedule had to be established in order to avoid all the HRUs receiving irrigation at the same time.

2.4 Model evaluation

The performance of the SWAT model was evaluated using the following statistical indices: percent bias (PBIAS), coefficient of determination (R^2), root mean square error (RMSE), RMSE-observations standard deviation ratio (RSR) and Nash-Sutcliffe efficiency (NSE) (Moriassi et al. 2007). The PBIAS measures the average tendency of simulated data to be larger or smaller than the observed counterparts. Positive and negative values indicate model underestimation and overestimation bias respectively. The

performance is better for small magnitudes of PBIAS. The R^2 represents the proportion of total variance in the observed data. Values range from 0 to 1, where 1 is the best performance. The NSE coefficient indicates how well the plot of observed vs simulated values fits the 1:1 line. Its value ranges from $-\infty$ to 1, with $\text{NSE} = 1$ being the optimal value. Lastly, RSR represents the ratio of RMSE and standard deviation of observed data. Its value ranges from 0 to a large positive value, with 0 being the optimal value.

To evaluate the daily and monthly results of this study, the following criteria were used: NSE satisfactory at >0.5 ; PBIAS satisfactory at below $\pm 25\%$ for streamflow and below $\pm 70\%$ for nitrogen; RSR satisfactory at <0.7 (Moriassi et al. 2007); and R^2 satisfactory at >0.5 (Green et al. 2006).

2.5 Data used for calibration and validation

The whole simulation was performed with a daily time step; the first 4 years (1986–1989) were excluded from the results since they were used as a warm-up period. The calibration “by stages” detailed by Nair et al. (2011), leaving nutrient load calibration as last step, has been used in many publications (e.g. Behera and Panda 2006, Ferrant et al. 2013) and seemed the most appropriate for our purposes. First, a sensitivity analysis was carried out in order to identify calibration parameters. Then, by manual calibration, the parameters presented in Table 4 were adjusted. Streamflow was the first variable to be

Table 4 Main variables used for sensitivity and calibration in SWAT.

Parameter	Input file	Description	Range	Calibrated value
EPCO	.bsn	Plant uptake compensation factor	0.01–1	1
ESCO	.bsn	Soil evaporation compensation factor	0.01–1	0.9
SURLAG	.bsn	Surface runoff lag coefficient	1–24	5
CDN	.bsn	Denitrification exponential rate coefficient	0–3	0.01
CMN	.bsn	Rate coefficient for mineralization of the humus active organic nutrients	0.0001–0.003	0.002
RSDCO	.bsn	Rate coefficient for mineralization of the residue fresh organic nutrients	0–0.1	0.01
NPERCO	.bsn	Nitrogen percolation coefficient	0.01–1	0.8
SDNCO	.bsn	Denitrification threshold water content	0–1	0.95
ALPHA_BF	.gw	Baseflow alpha factor	0–1	0.35
GW_DELAY	.gw	Groundwater delay	0–500	0.5
GW_REVAP	.gw	Groundwater revap coefficient	0.02–0.2	0.02
REVAPMN	.gw	Threshold depth of water in the shallow aquifer for revap to occur	0–8000	2000
GWQMN	.gw	Threshold depth of water in the shallow aquifer required for return flow to occur	0–5000	800
HLIFE_NGW	.gw	Half-life of the nitrate in shallow aquifer	0–5000	2500
CN2	.mgt	Curve number	0–100	$\pm 10\%$ of initial values

calibrated, although it was necessary to re-calibrate it once crop-related parameters had been well adjusted. After calibrating streamflow and crop yield, N cycle-related parameters were adjusted. Initial values for the following parameters were established using data provided by Neiker-Tecnalia: initial nitrate concentration in the shallow aquifer, SHALLST_N = 15 mg L⁻¹; initial nitrate concentration in the soil layer, SOL_NO3 = 5 mg kg⁻¹; and initial organic nitrogen concentration in the soil layer, SOL_ORGN = 700 mg kg⁻¹. For calibration and validation of the model the following field data was used:

2.5.1 Streamflow River discharge was calibrated at the outlet of the watershed using field measured water levels, which were converted to discharge using a rating curve. This work was performed within the framework of the Aguaflash Project (Interreg-SUDOE) by Cerro (2013). All available discharge data were used, from which the period 21 October 2009–31 December 2010 was used for calibration and 1 January 2011–31 December 2011 for validation. The most sensitive parameters to the water balance and the assigned values are shown in Table 4.

2.5.2 Crop yield Many studies have demonstrated the difficulties of capturing annual variations in crop yield well with the SWAT model (and the EPIC crop growth sub-model on which SWAT is based) (Huang *et al.* 2006, Srinivasan *et al.* 2010). For this reason, prediction of yield for individual years is not recommended (Moulin *et al.* 1993), and researchers use long-term average data to compare simulated and measured crop response variability. In this study, the crop yield evaluation focused on the comparison of simulated data with mean values from recent years (2002–2011). The studied crops were wheat, barley, oats, potato and sugar beet. Given the agricultural similarities between barley and oats, we decided to simulate them as a single group, which was renamed as barley (so, from now on, barley data will be a mean value for these two crops). Real crop yield data from the last 10 years were obtained from the Agricultural Department of the Basque Government. The SWAT model estimates dry crop yield and, hence, in order to perform comparisons with observed data (given in wet weight), simulated values (tonnes per hectare) were converted from dry to wet weights. For that conversion, the following moisture contents were considered: wheat and barley,

10%; potato, 75%; and sugar beet, 80% (Kenneth and Hellevang 1995, Scanlon 2005, NDSU 2006). The harvest index of sugar beet was adjusted in the crop database, owing to a rather low estimated yield. We assumed a value of 1.1 instead of the default value of 0.95. It should be kept in mind that simulated yield corresponds to the potential value and so higher yields than observed values were expected in the simulation.

The evapotranspiration process was calculated by the Hargreaves PET method.

2.5.3 Nitrogen In the context of different research studies, N-NO₃ concentration has been measured in the Alegria River in three different periods: 1990–1994, 2001–2005 and 2009–2011. Arrate (1994) made an exhaustive hydrogeological study of the Quaternary aquifer of Vitoria-Gasteiz. He gathered the water quality data from wells and the river for spatial and temporal analyses. Martinez (2008) focused her research on the hydrochemical temporal evolution of surface water and groundwater. Cerro (2013) studied the impact of floods on water quality, for which she monitored physicochemical parameters in the Alegria River over a period of two years.

Commonly, in the field, what is measured is nitrate concentration (mg L⁻¹); hence, in order to process SWAT-simulated nitrogen export, it was essential to convert the field-measured concentrations into continuous series of N-NO₃ load (t d⁻¹). To do so, a continuous streamflow dataset is required. However, given that in the first two periods mentioned above there were no field-measured streamflow data, it was decided to use the simulated streamflow values in all the cases, once values during both calibration and validation had shown a good fit. Therefore, simulated streamflow and scattered field-measured N-NO₃ concentrations were used to obtain continuous load data series. This was performed with LOADEST, a FORTRAN program commonly used to estimate constituent load in streams and rivers (Runkel *et al.* 2004). There are several uncertainties in this process: first, the uncertainty inherent in the discharge values used, these being simulated; and, second, the representation of daily N-NO₃ load based on one or two measurements per month for some cases, especially during 1990–1994 (Arrate 1994) and 2001–2005 (Martinez 2008). The N-NO₃ load was calibrated for the period 28 October 2009–27 October 2010 and validated for three different periods: Val-1: 27 November 1990–29 June 1994;

Val-2: 2 January 2001–22 December 2005; and Val-3: 28 October 2010–17 June 2011.

Nitrogen mass balance was calculated by equation (1) and results were expressed in terms of: (a) unit of mass per time (t N year^{-1}), calculated as seasonal mean values for the periods 1990–1999 and 2000–2011; (b) unit of mass per time and cultivated area ($\text{kg ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$), which represents annual mean values for each study period and only considering agricultural land cover (necessary data for validation of N fluxes); and (c) unit of mass per time and total area ($\text{kg ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$), which represents annual mean values for each period (necessary data for visualization of N fluxes at the sub-basin scale):

$$\Delta N = (N_{\text{fert}} + N_{\text{atm}} + N_{\text{min}}) - (N_{\text{denit}} + N_{\text{up}} + N_{\text{losses}}) \quad (1)$$

where N_{fert} is N in fertilizers and in irrigation water; N_{atm} is atmospheric N deposition; N_{min} is mineralized N; N_{denit} is N from denitrification; N_{up} is crop uptake N; and N_{losses} is N exported by streams.

The N fluxes on arable land (N wash-off, N uptake by plants, N denitrification and N mineralization) were indirectly validated by the comparison of

simulated data with data obtained by Sanchezperez *et al.* (2003) and Jégo *et al.* (2008) in studies carried out in the same study area. In addition, the literature was consulted to contrast the results with reasonable ranges in agricultural lands (Krysanova and Haberlandt 2002, Burkart *et al.* 2005, Castaldelli *et al.* 2013, Ferrant *et al.* 2013, Boithias *et al.* 2014). To simulate atmospheric deposition a rainfall nitrogen concentration value was estimated (1 mg L^{-1}) so that annual deposition was similar to the data obtained by Sanchezperez *et al.* (2003) in the same area. In order to fit N fluxes and transport within the watershed, the most sensitive parameters were adjusted (Table 4).

3 RESULTS AND DISCUSSION

3.1 Hydrology

For the period 1990–2011, the model interpolated 660 mm mean annual precipitation, of which 68% was lost by evapotranspiration. The estimated values seemed to be within acceptable ranges according to available data for the study area (Cerro 2013).

Precipitation data of the periods 1990–1999 and 2000–2011 (Fig. 3) suggest drier summers and wetter

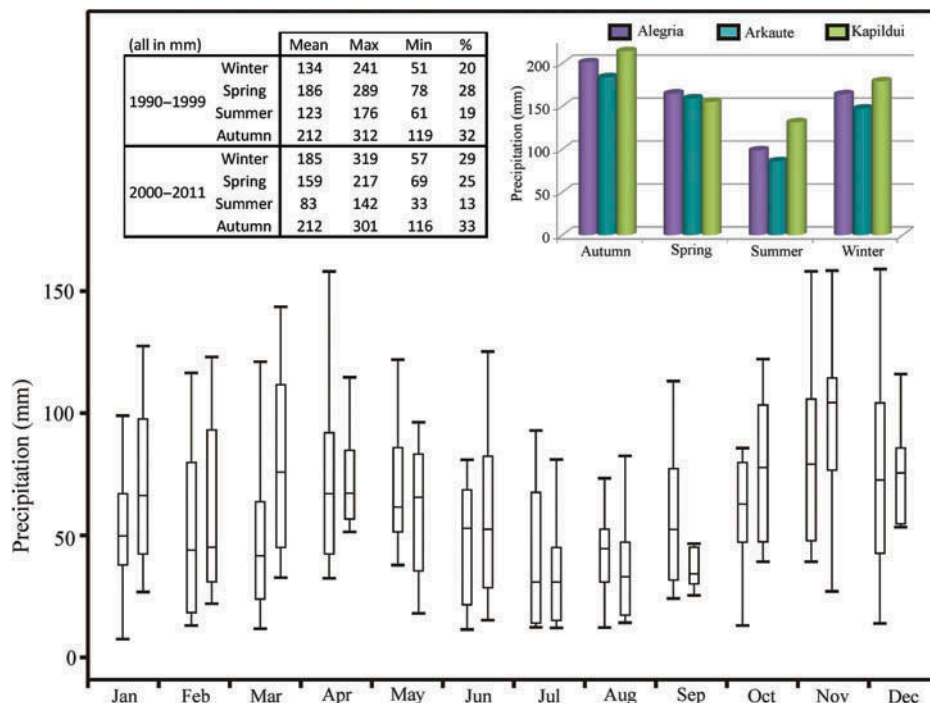


Fig. 3 Paired box plots reporting average monthly rain data from three meteorological stations and corresponding to the periods 1990–1999 and 2000–2011. Median, 25th and 75th percentiles, and minimum and maximum values are shown. The table provides statistical information (mean, maximum, minimum and percentage) about seasonal precipitation and the graph represents the seasonal precipitation average in each of the meteorological stations considered in the study.

winters during the second period. In the upper part of Fig. 3 the seasonal mean precipitation values for each meteorological station considered in the study are shown. In general, it can be noted that Kapildui is the station in which higher precipitation is registered and Arkaute is the one with the lower precipitation. The lengths of the box plots in Fig. 3 indicate greater variability in the rainfall during the second period in most months.

Mean daily discharge for the calibration period was $0.39 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ in the observed data and $0.43 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ in the simulated data. For the validation period, the observed and simulated mean discharges were 0.22 and $0.21 \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, respectively. Daily discharges were satisfactorily simulated in the calibration period and showed good agreement during the validation period (Fig. 4; Table 5). Although baseflow was simulated quite well, most of the streamflow peaks were underestimated. It is important to note that the highest flow peak (January 2010) was related to snowmelt. Multiple iterations were completed, changing parameters linked to snow, in order to obtain a better fit

of the hydrograph; however, for this event this process was not very successful. Another point to be highlighted is the uncertainty associated with the observed streamflow data. As noted by Cerro *et al.* (2014a), there are some uncertainties in the rating curve for very high flows. In addition, we should remember that there is uncertainty related to the interpolation of rainfall data, an aspect that could have influenced the simulation of high-flow values.

Based on the statistical indices, flow simulations are, in the worst case, satisfactory. In general, the statistical indices improve from daily to monthly analysis as long-term means have relatively smaller errors than short-term values (Winter 1981) (Table 5). Specifically, for the daily analysis, the NSE and R^2 values for the model were 0.59 and 0.59, respectively, for the calibration period and 0.72 and 0.73 for validation period, while for the monthly analysis, NSE and R^2 were 0.85 and 0.88, respectively, for the calibration period and 0.95 and 0.95 for the validation period. In all cases, PBIAS was at worst case 11%, and also RSR indicated satisfactory results.

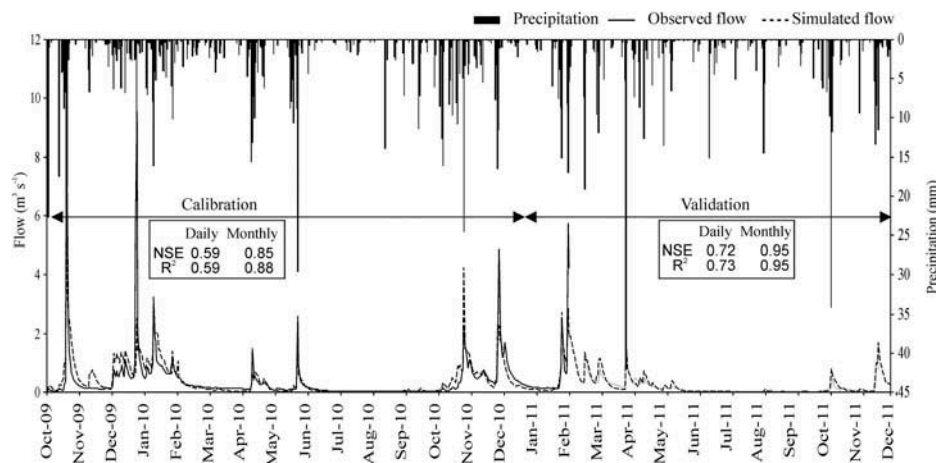


Fig. 4 Observed and simulated daily discharge at the Alegria watershed outlet ($\text{m}^3 \text{ d}^{-1}$). Daily and monthly statistical values are provided for calibration and validation periods.

Table 5 Statistical summary for streamflow and nitrates.

	Streamflow				Nitrate							
	Daily		Monthly		Daily				Monthly			
	Cal.	Val.	Cal.	Val.	Cal.	Val-1	Val-2	Val-3	Cal.	Val-1	Val-2	Val-3
NSE	0.59	0.72	0.85	0.95	0.77	0.74	0.73	0.75	0.92	0.94	0.94	0.67
R^2	0.59	0.73	0.88	0.95	0.86	0.76	0.74	0.83	0.99	0.96	0.95	0.91
PBIAS (%)	-10	6	-11	4	-7	7	-12	29	-7	7	12	28
RSR	0.64	0.53	0.39	0.24	0.48	0.51	0.52	0.50	0.29	0.25	0.25	0.57

Simulated annual water yield calculated from the recorded precipitation grouped into periods 1990–1999 and 2000–2011 was quantified as 12 and 13 hm³. Field measurements indicate that, during the streamflow calibration period (15 months) 15 hm³ was exported from the watershed through the main channel, while during the validation period (12 months) it was 7 hm³. Simulation results show similar values, 16 and 8 hm³ being the exported water yield for calibration and validation periods, respectively.

The streamflow components indicate that 85% is contributed by groundwater, 3% by lateral flow and 12% by surface runoff. This distribution of components corresponds well to the special characteristics of lowland areas, as reported by Lam *et al.* (2011).

3.2 Crop yield

Although the annual variability of crop yield was not well reproduced, simulated crop yields were well adjusted to the observed values in the longer term (10 years). Observed and simulated mean values for the period 2002–2011 were, respectively: 5.4 and 5.2 t ha⁻¹ year⁻¹ for wheat; 4.8 and 7.0 t ha⁻¹ year⁻¹ for barley; 34.7 and 40.6 t ha⁻¹ year⁻¹ for potato; and 80.9 and 84.7 t ha⁻¹ year⁻¹ for sugar beet. In principle, higher values were expected for the simulated yield, as they represent the potential crop yield not influenced by any disease. Further, differences between the observed and simulated yields on the annual scale could be explained by discrepancies between the observed and simulated crop stresses: with the

simplification of adopting fixed planting and harvesting dates (throughout the simulation period), we have not taken into account modifications in dates that could have been made by farmers due to the meteorological conditions in a given year. The differences in crop cycles from year to year are likely to imply different levels of stress to that simulated, which in turn will have an impact on simulated crop yield.

Figure 5 illustrates the simulated annual dry yield for each crop, and also the mean annual precipitation (mm) and solar radiation (MJ m⁻² d⁻¹). Although a slight positive relationship can be perceived between precipitation and solar radiation with crop yield, it is difficult to obtain good regression coefficients on the annual scale.

3.3 Nutrients

3.3.1 Soil nitrogen mass balance In the nitrogen mass balance, a positive ΔN value means that nitrogen is being retained in the system and negative ΔN that nitrogen inputs are lower than outputs during a given period, considering the outputs as the N losses by all the possible pathways. The nitrogen mass balance results were processed to obtain representative differences between the periods 1990–1999 and 2000–2011 (Tables 6 and 7; Fig. 6).

In the Fig. 6 the input, output and surplus differences between the two periods can be distinguished: the lower N input and output during the period 2000–2011 led to a lower N surplus over the study area. These maps not only show the differences between

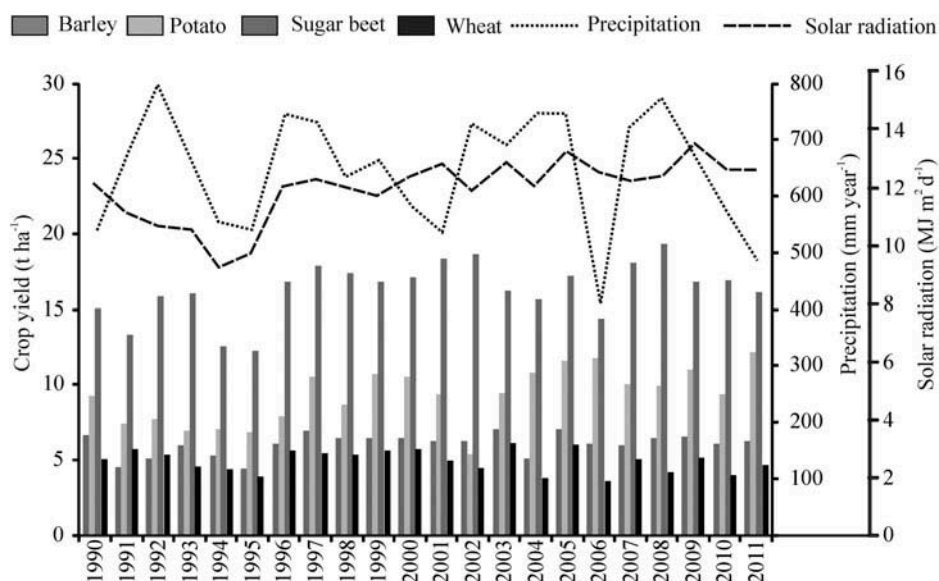


Fig. 5 Simulated annual crop yield (t ha⁻¹ year⁻¹), mean precipitation (mm year⁻¹) and mean solar radiation (MJ m⁻² d⁻¹).

Table 6 Soil system N budget for cultivated lands in the Alegria River watershed (annual average values and standard deviation are given). Values are expressed per hectare of cultivated land ($\text{kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$).

	1990–1999		2000–2011	
	$\text{kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$	% of total	$\text{kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$	% of total
<i>Input</i>				
Fertilization	260 (27)	61	185 (14)	54
Atmospheric deposition	7 (1)	2	6 (1)	2
Mineralization	159 (11)	37	149 (10)	44
ΣInput	426 (34)	100	340 (21)	100
<i>Output</i>				
Plant uptake	206 (20)	66	211 (18)	77
Denitrification	64 (17)	21	30 (7)	11
Stream losses	40 (12)	13	34 (12)	12
ΣOutput	312 (31)	100	275 (27)	100
ΣInput – Σoutput	114 (41)		65 (19)	

the periods, but also allow one to identify the zones that contribute most to the N pollution of the watershed.

The simulation results of total N input to the system show an input of $1668 \pm 124 \text{ t year}^{-1}$ in 1990–1999 and $1364 \pm 76 \text{ t year}^{-1}$ in 2000–2011 (Table 7). In Table 6, inputs and outputs are expressed in percentages. The main N input is from fertilization (54–61% of the total) followed by that

from mineralization process both of humus and active pools (37–44%), and lastly, from atmospheric deposition (2%).

Total N output was estimated to be 1231 ± 119 and 1091 ± 103 for the periods 1990–1999 and 2000–2011, respectively (Table 7). The main N output is due to plant uptake (66–77%), followed by stream losses (12–13%) and denitrification (11–21%) (Table 6). Each of the processes shows quite large variability within a given year, mainly due to the distribution of fertilization and precipitation. In order to quantify the differences over the year, N balance inputs and outputs were averaged for each season for the periods 1990–1999 and 2000–2011 (Table 7). It should be noted, though, that in Table 7 total inputs and outputs are represented, and these are affected not only by meteorology and crop growth stage, but also by the surface area occupied by each crop during the corresponding period. Regarding the N inputs, it should be noted that the highest values are registered during spring and are related to fertilization. Mineralization is the second process that contributes notably to N inputs, the maximum value being registered in autumn, coinciding with the harvesting days. In contrast, plant uptake is the process which most contributes to the N output, with maximum values during spring in both periods. However, whereas in the period

Table 7 Soil system N budget for the Alegria River watershed (annual seasonal average values and standard deviation are given). Values are expressed as mass net values (t N year^{-1}).

	1990–1999				2000–2011			
	High fertilization doses + irrigation water taken from the aquifer				Low fertilization doses + irrigation water taken from the aquifer			
	Winter	Spring	Summer	Autumn	Winter	Spring	Summer	Autumn
<i>Input</i>								
Fertilization	343 (33)	580 (86)	38 (21)	0 (0)	208 (13)	474 (39)	0 (0)	0 (0)
Atmospheric deposition	7 (3)	10 (4)	7 (2)	11 (3)	10 (4)	8 (2)	4 (2)	11 (3)
Mineralization	182 (17)	115 (18)	143 (22)	233 (21)	154 (7)	92 (4)	181 (11)	221 (22)
ΣInput (Seasonal)	532 (43)	704 (94)	187 (18)	245 (22)	372 (20)	575 (42)	185 (11)	232 (23)
ΣInput (Total)	1668 (124)				1364 (76)			
<i>Output</i>								
Plant uptake	136 (59)	510 (59)	141 (57)	25 (7)	234 (47)	518 (60)	48 (10)	35 (14)
Denitrification	69 (20)	71 (26)	49 (12)	58 (11)	34(8)	31 (7)	23 (6)	31 (7)
Stream losses	61 (40)	37 (41)	8 (7)	65 (40)	67 (37)	18 (15)	3 (2)	49 (29)
ΣOutput (Seasonal)	266 (76)	619 (70)	198 (61)	148 (45)	335 (45)	567 (63)	74 (14)	115 (41)
ΣOutput (Total)	1231 (119)				1091 (103)			
ΣInput – Σoutput (Seasonal)	266 (114)	86 (114)	–11 (65)	96 (39)	37 (36)	118 (28)	111 (17)	118 (28)
ΣInput – Σoutput (Total)	437 (156)				273 (72)			

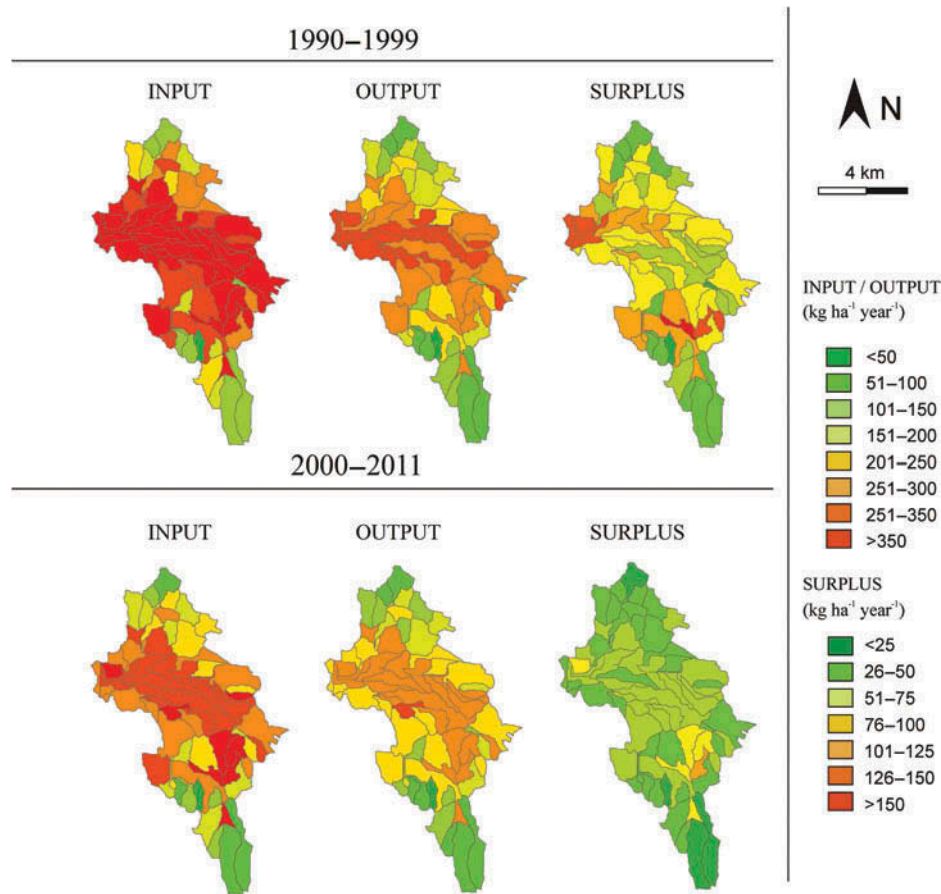


Fig. 6 Spatial distribution of simulated nitrogen input, output and surplus (kg N ha⁻¹ year⁻¹) for the periods 1990–1999 and 2000–2011.

1990–1999 N uptake is quite significant during the winter and summer, in the period 2000–2011, the values are quite low during the summer. This may be due, in part, to the change of crop type and, in turn, the crop cycle from one period to the other. Denitrification decreases from first to the second period, but remains quite similar over the seasons except for summer, where meteorological conditions are less favourable for this process to occur. In both the periods 1990–1999 and 2000–2011, stream losses are the highest during autumn and winter, a fact directly linked to the precipitation registered during these seasons.

In order to validate simulated N fluxes, only the results obtained from agricultural lands were considered. In this way, an indirect validation of the N balance was performed using regional and general ranges documented in the literature. The results obtained suggest a total N surplus equivalent to area weighted mean values of 114 and 65 kg ha⁻¹ year⁻¹ for 1990–1999 and 2000–2011, respectively (Table 6). The relationship between outputs and

inputs is estimated to be 73% in the first period and 81% in the second. These values seem to be within acceptable ranges. In fact, in a study carried out in the same area during the years 1993–1994, this relationship was estimated to be 87% on a cultivated area and 26% on non-cultivated land (Sanchezperez *et al.* 2003). As would be expected, the average value obtained in our study is much closer to that previously obtained for the cultivated area. This is attributable to the fact that our values were based on larger temporal and spatial scales, comprising the processes at the watershed scale, including those occurring in the intervals between cultivation periods.

The mineralization fluxes remained similar over time: 159 and 149 kg ha⁻¹ year⁻¹ for the 1990–1999 and 2000–2011 periods, respectively. These values are higher than those reported by Jégo *et al.* (2008) in the same study area, which range from 55 to 69 kg ha⁻¹ year⁻¹, but are within the range for general arable lands reported by Krysanova and Haberlandt (2002), ranging from 40 to 180 kg ha⁻¹ year⁻¹. In the

literature, N uptake ranges are reported for several different crops; grains have the lowest uptake (100–200 kg ha⁻¹ year⁻¹), while it is somewhat higher for root crops—potato: 142–233 kg ha⁻¹ year⁻¹ and sugar beet: 200–250 kg ha⁻¹ year⁻¹, according to Krysanova and Haberlandt (2002) and Tyler *et al.* (1983), respectively. In our study, annual mean values were calculated (Table 6): 206 and 211 kg ha⁻¹ year⁻¹ for the periods 1990–1999 and 2000–2011, respectively; these values seem to be within reasonable ranges. In any case, it is interesting to separate N uptake fluxes for each crop. The simulated results show 177, 199, 205 and 269 kg ha⁻¹ year⁻¹ for potato, barley, wheat and sugar beet, respectively.

The higher plant uptake for 2000–2011 compared to 1990–1999, together with the fact that the fertilization rate was markedly higher during the first period, provides evidence for the over-fertilization that has been occurring in recent decades in the watershed.

Regarding denitrification fluxes in arable lands, it can be noted that, whereas the value obtained for 1990–1999 (64 kg ha⁻¹ year⁻¹) is slightly higher than the ranges reported for general arable lands (20–60 kg ha⁻¹ year⁻¹ according to Krysanova and Haberlandt 2002), the value obtained for 2000–2011 (30 kg ha⁻¹ year⁻¹) is within the expected range.

Total N outputs were quantified and the relationship with regard to the precipitation regime

was obtained. In fact, meteorology is thought to be an important factor in determining the system N balance. On a seasonal scale, we did not find a strong association between the precipitation regime and total N output from the system. In contrast, on the annual scale, precipitation and N outputs are well correlated (Fig. 7). Indeed, this relationship demonstrates a difference in the effect of precipitation over the two periods: a given annual precipitation is associated with a considerably higher N output in the period 1990–1999 than in 2000–2011.

3.3.2 Nitrogen losses and nitrate concentration in surface waters Using calibrated parameter data, the SWAT model successfully predicted N-NO₃ load at the outlet of the Alegria River (Fig. 8). With a daily time step, the model performance was very good during the calibration period (NSE: 0.77) and good during the validation periods (NSE: 0.74, 0.73 and 0.75).

The main differences between the observed and simulated data can be seen in high peaks (Fig. 8). These differences might be associated with the following uncertainties: (a) streamflow calibration, which directly affects nutrient simulation; (b) representativeness of the data, especially for the periods 1990–1994 and 2001–2005, when field

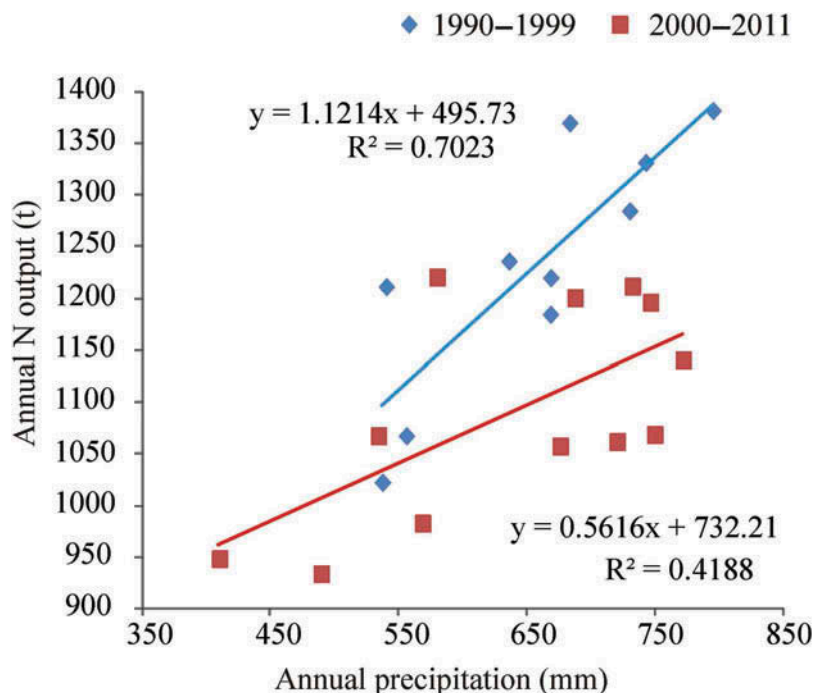


Fig. 7 Relationship between annual precipitation and annual N output for the periods 1990–1999 and 2000–2011.

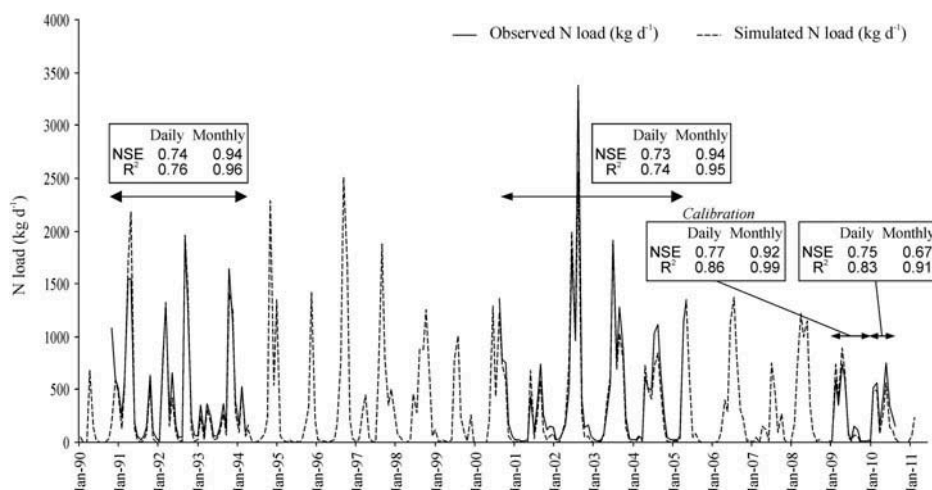


Fig. 8 Observed and simulated monthly average nitrogen load (kg N d^{-1}) at the Alegria watershed outlet. Daily and monthly statistical values are provided for calibration and validation periods.

measurements used for daily estimates were scarce; and (c) input related to management practices, which have been assumed to be the same over time in the simulation.

The high nitrate peaks coincide with flood events, reflecting the fact that they are pushed through the system in rainy periods. During the drought season, nitrate tends to accumulate in the aquifer, behaving as nitrate storage, until higher water flows flush them out (Cerro *et al.* 2014a). Indeed, the annual exported amount of nitrate is largely controlled by hydrological conditions (simulated water yield and nitrogen export in the period 1990–2011 having a value of $R^2 = 0.74$).

There is a pronounced decrease in exported N-NO_3 over the years. While in 1990–1999 the mean simulated annual value was 132 t, in 2000–2011 it

fell to 110 t. Although a lower precipitation regime could explain lower export during a given year, we think that for longer periods only a reduction in fertilizer use and change in irrigation water origin could explain this reduction in the exported nitrogen.

The general trend of nitrate concentration (mg L^{-1}) in Alegria River was adequately simulated (Fig. 9). It should be noted that, whereas simulated NO_3 monthly averages were calculated from daily data, the observed NO_3 averages were obtained from data with a highly-scattered sampling frequency (in many cases one or two samples per month in the periods 1990–1994 and 2000–2005). A more accurate sampling strategy between 2009 and 2011 is reflected in less variation between the observed and simulated monthly averages. Especially in the last period, it can be seen that during the low water level periods the difference between the observed

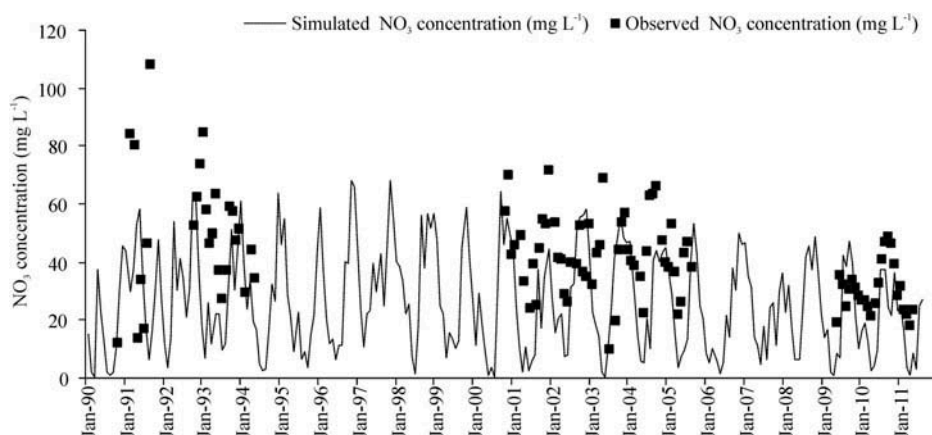


Fig. 9 Observed and simulated monthly average nitrate concentration ($\text{mg NO}_3 \text{ L}^{-1}$) at the Alegria watershed outlet.

and simulated nitrate concentration is higher. This pattern has already been studied by several authors (Arrate 1994, Martinez 2008) and has been linked to the N uptake by plants in river channels.

3.3.3 Nitrate concentration in groundwater

The assumption of no interaction between HRUs and the lack of a full groundwater balance (SWAT only simulates nutrients in a shallow aquifer) may mean that groundwater contributions to streamflow are not representative of the nitrate concentration in the aquifer. However, in the present study, the fact that groundwater is the main streamflow component in an area where the aquifer is quite shallow, there is no regional discharge and there is diffuse pollution over the 85% of the aquifer, led us to think about the possibility of simulating groundwater nitrate concentration through the groundwater contribution to streamflow.

Following this approach, we calculated the mean NO_3 concentration in the groundwater contribution to streamflow and obtained a similar trend to that described by Sanchezperez *et al.* (2003), which was representative of the groundwater NO_3 concentration. Figure 10 represents the mean annual NO_3 concentration for all the HRUs in the watershed and also the concentration obtained from cultivated HRUs. As can be observed, the mean watershed nitrate concentration increases over the first years of the simulation,

reaching maximum values during the 1990s decade and decreasing over the following years, a pattern that has already been reported by several authors (Arrate *et al.* 1997, Sanchezperez *et al.* 2003, Martinez 2008). The trend was directly linked to high fertilizer doses applied during the 1990s, as well as to the recirculation of the water used for irrigation. Further, there is also considerable difference between the trend in global nitrate concentration (all HRUs of the watershed) and the trend obtained from cultivated HRUs. The latter shows an annual concentration value approx. $10\text{--}20\text{ mg L}^{-1}$ higher than the annual value obtained from HRUs of the entire watershed.

3.3.4 N dynamics The environmental impact of the agricultural practices is controlled by the crop type, hydrometeorological conditions, crop management practices and soil characteristics (Jégo *et al.* 2008). In Fig. 11, it can be observed that both N export (t year^{-1}) through streams and nitrate concentration in the river (mg L^{-1}) are highly dependent on the precipitation regime ($R^2 = 0.75$). In the same figure, the different pathways for discharge flow are presented. It can be seen that groundwater flow is the dominant pathway, accounting for 85% of the total discharge, on average. It should be noted that the low value of lateral flow is related to a shallow

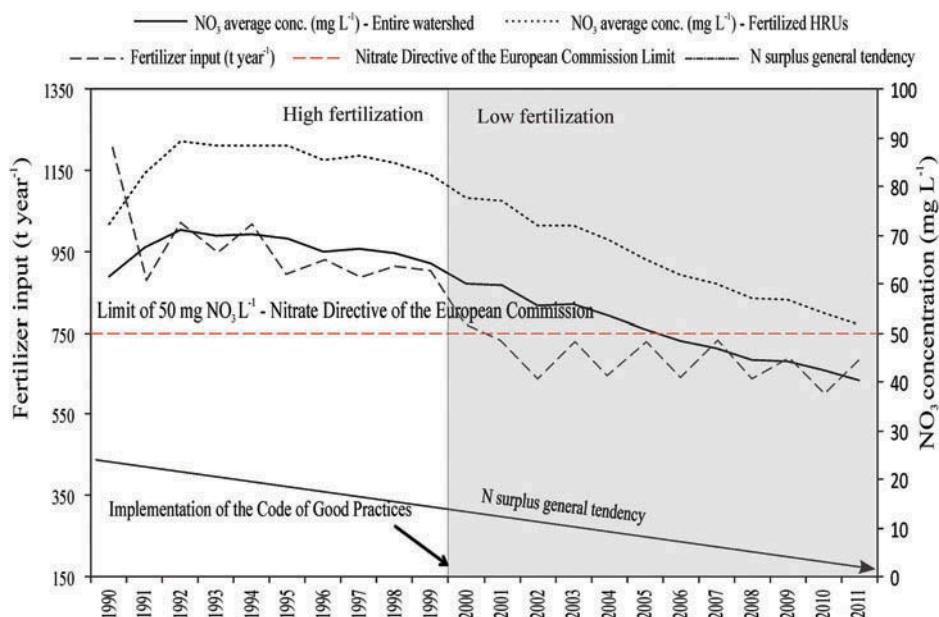


Fig. 10 Simulated annual evolution of groundwater NO_3 concentration ($\text{mg NO}_3\text{ L}^{-1}$) (considering the HRUs of the entire watershed and only the agricultural HRUs) and annual fertilizer input (t year^{-1}). High and low fertilization periods (1990–1999 and 2000–2011, respectively) are highlighted. The dashed (red) line indicates the nitrate limit set by the European Commission and the arrow the simulated trend of annual N surplus.

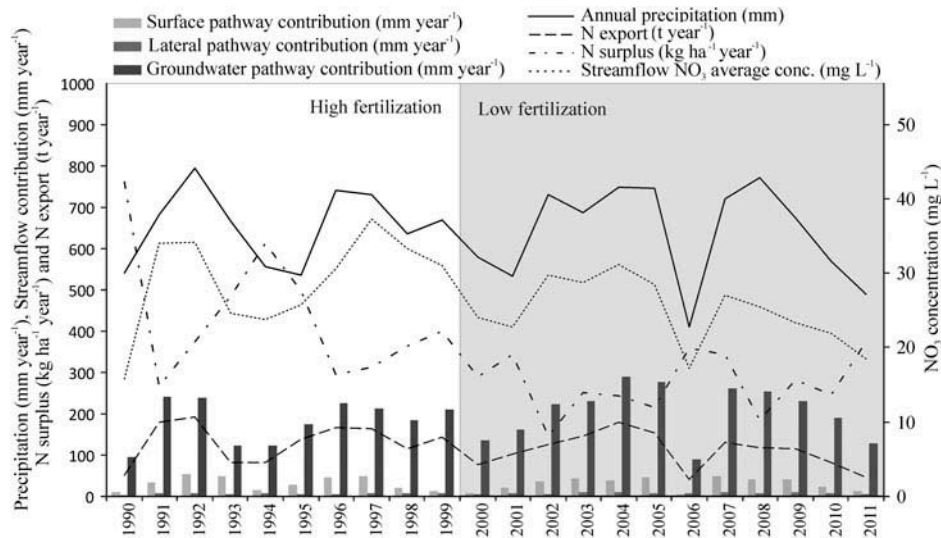


Fig. 11 Simulated annual streamflow contribution by surface, lateral and groundwater pathways. High and low fertilization periods (1990–1999 and 2000–2011, respectively) are highlighted. Annual precipitation (mm year^{-1}), N surplus ($\text{kg N ha}^{-1} \text{ year}^{-1}$), N export (t N year^{-1}) and streamflow NO_3 concentration ($\text{mg NO}_3 \text{ L}^{-1}$) are also shown.

groundwater table and the small surface contribution due to the flat topography (Lam *et al.* 2010). Table 8 summarizes the correlation between each of the water contribution pathways and annual precipitation, N export and nitrate concentration in the river. In each case, 22 values were considered, and both Pearson correlation and bilateral significance are shown. Annual precipitation has high correlation coefficients with surface and groundwater contributions: $R^2 = 0.841$ ($p < 0.01$) and 0.847 ($p < 0.01$),

respectively, the groundwater contribution being the factor most strongly correlated with N export: $R^2 = 0.841$ ($p < 0.01$). Figure 10 shows annual groundwater NO_3 concentration. It can be appreciated that it does not follow the annual variability seen in the river concentration, showing in contrast a stronger response to fertilizer input than to meteorological conditions (Table 8). Figure 10 illustrates the lag time required to decrease nitrate concentration in the aquifer after environmental measures have been

Table 8 Correlation matrix of simulated variables obtained by SWAT model.

	Prec.	SW	LW	GW	Fert.	ΔN	N export	GW conc.	River conc.
Prec.	1								
SW	0.841** 0.000	1							
LW	0.308 0.163	0.424*	1						
GW	0.847** 0.000	0.723** 0.000	0.563** 0.006	1					
Fert.	0.003 0.990	-0.040 0.859	-0.499* 0.018	-0.334 0.128	1				
ΔN	-0.485* 0.022	-0.408 0.060	-0.472* 0.027	-0.675** 0.001	0.782** 0.000	1			
N export.	0.807** 0.000	0.720** 0.000	0.379 0.082	0.841** 0.000	0.069 0.761	-0.423* 0.050	1		
GW conc.	0.142 0.527	0.106 0.640	-0.297 0.180	-0.142 0.529	0.780** 0.000	0.433* 0.044	0.369 0.092	1	
River conc.	0.760** 0.000	0.610** 0.003	0.298 0.178	0.681** 0.000	0.128 0.572	-0.418 0.053	0.883** 0.000	0.492* 0.020	1

** Correlation significant at $p = 0.01$ level, * significant at $p = 0.05$ level.

Prec.: precipitation, SW: surface water contribution, LW: lateral contribution, GW: groundwater contribution, Fert.: fertilization, ΔN : N surplus, GW conc.: groundwater concentration; River conc.: river concentration.

taken. We estimate that a 25% decrease in fertilizer use led to a decrease of around 30% in both aquifer concentration and nitrogen export through river discharge. It took approximately a decade from the date the implementation of the Code of Good Practices became compulsory, in 2000, until the nitrate concentration in the aquifer reached the target set in the code. The relationship between nitrogen export and precipitation regime can be explained by the nutrient flushing process. Usually, nutrients are flushed out of the landscape during hydrologically active periods, especially during flood events, while in drier ones they are retained in the aquifer (Oeurng *et al.* 2010, Cerro *et al.* 2014a). This would explain the higher nitrate concentration in the river when precipitation is high. The flushing process may have different origins, such as, for instance, the common surface runoff occurring after saturation of the nitrogen-enriched top layers (Bhat *et al.* 2007, Oeurng *et al.* 2010, Zhang *et al.* 2010). However, in the Alegria River watershed, this explanation does not apply, as the groundwater is the main source for the nitrates in the streams. In this watershed, the larger proportions of both water and nutrients are first stored in the aquifer and are then released into the streams. This behaviour was analysed by Cerro *et al.* (2014b), who carried out an exhaustive study of the nitrate transport during floods in the watershed. Their simulation results estimated that 97% of the total N export came through the aquifer to the main stream.

Though the regression coefficient was not high ($R^2 = 0.17$; Table 8), N surplus follows an opposite tendency to nitrogen export or nitrate concentration in streams (Fig. 11). This can be explained by the strong correlation of N surplus with groundwater contribution and annual fertilizer input, which, in turn, affect the nitrogen export and nitrate concentration in streams, among other factors.

To sum up, whereas the groundwater concentration shows a direct response to fertilizer input ($R^2 = 0.78$; $p < 0.01$), the streamflow concentration is influenced mainly by exported N (a relationship that shows $R^2 = 0.883$; $p < 0.01$). Exported nitrogen is, in turn, highly correlated to the annual precipitation ($R^2 = 0.807$; $p < 0.01$).

4 CONCLUSIONS

In this study, the SWAT model was used to simulate (for the period 1990–2011) discharge and N-NO₃ load in the Alegria River outlet, and crop yield and nitrogen fluxes in arable lands. Streamflow

simulation showed satisfactory and good agreement with the observed data for the calibration and validation periods (NSE and R^2 at the daily time step of, respectively, 0.59 and 0.59 for the calibration period and 0.72 and 0.83 for the validation period). Although in the long term (10 years) crop yield was well simulated on average, the model did not give a good fit of the annual variation in crop yield.

In addition, the N fluxes were indirectly validated by comparing the simulated values with general ranges for arable land available in the literature. The results obtained in this study showed that, in arable land, N inputs in the watershed exceeded outputs by 114 and 65 kg ha⁻¹ year⁻¹ in the periods 1990–1999 and 2000–2011, respectively. These results could be linked to hydrological conditions, as well as to the agricultural management in each period. The higher plant N uptake in 2000–2011 compared to 1990–1999, where the fertilization rate was known to be higher during the first period, underlines the over-fertilization that has occurred in the watershed in recent decades. The nitrate load in the river outlet showed very good performance, with NSE and R^2 at a daily time step of, respectively, 0.77 and 0.86 in the calibration period, and in the ranges 0.73–0.75 and 0.76–0.83, respectively, in the validation periods.

Hydrometeorological conditions, crop type and management, and soil characteristics are the factors that most influence the environmental impact of agricultural practices. Our results have shown the slow response of nitrate concentration in the aquifer to the decrease in fertilizer doses. Specifically, it seems that it took a decade to reach the target of the Code of Good Practices adopted in 2000.

We have deduced that in the long term, N surplus generally follows the trend in fertilization input, which directly affects the groundwater nitrate concentration. However, streamflow nitrate concentration is governed not only by groundwater nitrate concentration but also by surface water contribution. Due to the aquifer characteristics, it has been possible to reproduce historical trends in aquifer nitrate concentration with the SWAT hydrological model, an achievement that has not been reported before for any other watershed. We also note that SWAT can be used in similar hydrogeological and agricultural settings to obtain annual groundwater concentration tendency. Moreover, it is remarkable that the nitrate groundwater concentration in the aquifer is within the target of the European Nitrate Directive with the actual agricultural management.

Acknowledgements The authors would like to thank Amaia Ortiz (Basque Research and Development Agriculture Institute (NEIKER) for her help and data provision.

Disclosure statement No potential conflict of interest was reported by the author(s).

Funding The authors thank the Government of the Basque Country (for the grant given by the Department of Environment and Regional Planning; Consolidated Research Group IT598/13) and the University of the Basque Country (UFI 11/26) for their support.

REFERENCES

- 2000/60/EC, 2000. Directive 2000/60/EC concerning the establishment of a framework for Community action in the field of water policy. *Official Journal*, L327, 73.
- 91/676/EEC, 1991. Directive 91/676/EEC concerning waters against pollution caused by nitrates from agricultural sources. *Official Journal*, L135, 8.
- Arnold, J.G., et al., 1998. Large area hydrologic modeling and assessment Part I: model development. *Journal of the American Water Resources Association*, 34 (1), 73–89. doi:10.1111/j.1752-1688.1998.tb05961.x
- Arrate, I., 1994. *Estudio hidrogeológico del acuífero cuaternario de Vitoria-Gasteiz (Araba, País Vasco)*. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Arrate, I., et al., 1997. Groundwater pollution in Quaternary aquifer of Vitoria-Gasteiz (Basque Country, Spain). *Environmental Geology*, 30 (3–4), 257–265. doi:10.1007/s002540050155
- Behera, S. and Panda, R.K., 2006. Evaluation of management alternatives for an agricultural watershed in a sub-humid subtropical region using a physical process based model. *Agriculture, Ecosystems and Environment*, 113, 62–72. doi:10.1016/j.agee.2005.08.032
- Bhat, S., et al., 2007. Surface runoff contribution of nitrogen during storm events in a forested watershed. *Biogeochemistry*, 85, 253–262. doi:10.1007/s10533-007-9131-1
- Bijay-Singh, Y.-S. and Sekhon, G.S., 1995. Fertilizer-N use efficiency and nitrate pollution of groundwater in developing countries. *Journal of Contaminant Hydrology*, 20, 167–184. doi:10.1016/0169-7722(95)00067-4
- Boithias, L., et al., 2014. Daily nitrate losses: implication on long-term river quality in an intensive agricultural catchment of southwestern France. *Journal of Environmental Quality*, 43 (1), 46–54. doi:10.2135/jeq2011.0367.
- Borah, D.K. and Bera, M., 2003. Watershed-scale hydrologic and non-point source pollution models: review of mathematical bases. *Transactions of the ASAE*, 46 (6), 1553–1566. doi:10.13031/2013.15644
- Bracmort, K.S., et al., 2006. Modeling long-term water quality impact of structural BMPs. *Transactions of the ASABE*, 49 (2), 367–374. doi:10.13031/2013.20411
- Burkart, M., et al., 2005. Impacts of integrated crop-livestock systems on nitrogen dynamics and soil erosion in western Iowa watersheds. *Journal of Geophysical Research*, 110, G01009. doi:10.1029/2004JG000008.
- Castaldelli, G., et al., 2013. Nitrogen budget in a lowland coastal area within the Po River basin (northern Italy): multiple evidences of equilibrium between sources and internal sinks. *Journal of Environmental Management*, 52, 567–580. doi:10.1007/s0026-013-0052-6.
- Cerro, I., 2013. *Impacto de las crecidas en la calidad del agua (Cuenca agrícola del río Alegria, País Vasco). Aplicación del modelo agro-hidrológico SWAT*. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Cerro, I., et al., 2014a. Variability of particulate (SS, POC) and dissolved (DOC, NO₃) matter during storm events in the Alegria agricultural watershed. *Hydrological Processes*, 28 (5), 2855–2867. doi:10.1002/hyp.9850.
- Cerro, I., et al., 2014b. Simulating land management options to reduce nitrate pollution in an agricultural watershed dominated by an alluvial aquifer. *Journal of Environmental Quality*, 43 (1), 67–74. doi:10.2134/jeq2011.0393.
- Exner, M.E., Perea-Estrada, H., and Spalding, R.F., 2010. Long-term response of groundwater nitrate concentrations to management regulations in Nebraska's central Platte Valley. *The Scientific World Journal*, 10, 286–297. doi:10.1100/tsw.2010.25
- Ferrant, S., et al., 2011. Understanding nitrogen transfer dynamics in a small agricultural catchment: comparison of a distributed (TNT2) and a semi distributed (SWAT) modeling approaches. *Journal of Hydrology*, 406, 1–15. doi:10.1016/j.jhydrol.2011.05.026
- Ferrant, S., et al., 2013. Simulating the long term impact of nitrate mitigation scenarios in a pilot study basin. *Agricultural Water Management*, 124, 85–96. doi:10.1016/j.agwat.2013.03.023
- Gassman, P.W., et al., 2007. The soil and water assessment tool: historical development, applications, and future research directions. *Transactions of the ASABE*, 50 (4), 1211–1250. doi:10.13031/2013.23637
- Green, C.H., et al., 2006. Hydrologic evaluation of the soil and water assessment tool for a large tile-drained watershed in Iowa. *Transactions of the ASABE*, 49 (2), 413–422. doi:10.13031/2013.20415
- Huang, M., et al., 2006. An evaluation of EPIC soil water and yield components in the gully region of Loess Plateau, China. *The Journal of Agricultural Science*, 144, 339–348. doi:10.1017/S0021859606006101
- Iñiguez, J., et al., 1980. *Mapa de suelos de Alava*. Vitoria-Gasteiz: Diputación Foral de Alava-Departamento de Edafología de la Universidad de Navarra.
- Jégo, G., et al., 2008. Evaluation of the impact of various agricultural practices on nitrate leaching under the root zone of potato and sugar beet using the STICS soil-crop model. *Science of The Total Environment*, 394, 207–221. doi:10.1016/j.scitotenv.2008.01.021
- Kenneth, J. and Hellevang, P.E., 1995. *Grain moisture content effects and management*. NDSU Extension Service. North Dakota State University. Fargo, ND.
- Koch, F.J., et al., 2012. The effects of land use change on hydrological responses in the Choke Mountain Range (Ethiopia) – a new approach addressing land use dynamics in the model SWAT. In: R. Seppelt, et al., eds. *International Environmental Modelling and Software Society (IEMSs)*, 1–5 July Leipzig.
- Krysanova, V. and Haberlandt, U., 2002. Assessment of nitrogen leaching from arable land in large river basins. Part I. Simulation experiments using a process-based model. *Ecological Modelling*, 150, 255–275. doi:10.1016/S0304-3800(01)00525-7
- Lam, Q.D., Schmalz, B., and Fohrer, N., 2010. Modelling point and diffuse source pollution of nitrate in a rural lowland catchment using the SWAT model. *Agricultural Water Management*, 97, 317–325. doi:10.1016/j.agwat.2009.10.004

- Lam, Q.D., Schmalz, B., and Fohrer, N., 2011. The impact of agricultural best management practices on water quality in a North German lowland catchment. *Environmental Monitoring and Assessment*, 183, 351–379. doi:10.1007/s10661-011-1926-9
- LIDAR map of the Basque Country, 2008. Available at www.neuskadi.net [Accessed 12 March 2011].
- Liu, R., et al., 2013. Assessment of effects of best management practices on agricultural non-point source pollution in Xiangxi River watershed. *Agricultural Water Management*, 117, 9–18. doi:10.1016/j.agwat.2012.10.018
- Martinez, M., 2008. *Dinámica espacio-temporal de la calidad de las aguas de la Zona Vulnerable de Vitoria-Gasteiz (País Vasco)*. Thesis (PhD). University of Basque Country (UPV-EHU).
- Moriassi, D.N., et al., 2007. Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations. *Transactions of the ASABE*, 50 (3), 885–900. doi:10.13031/2013.23153
- Moulin, A.P. and Beckie, H.J., 1993. Evaluation of the CERES and EPIC models for predicting spring wheat yield over time. *Canadian Journal of Plant Science*, 73, 713–719. doi:10.4141/cjps93-093
- Nair, S., et al., 2011. Importance of crop yield in calibrating watershed water quality simulation tools. *JAWRA Journal of the American Water Resources Association*, 47 (6), 1285–1297. doi:10.1111/j.1752-1688.2011.00570.x
- NDSU (North Dakota State University), 2006. Sugar beets can make good silage. Plant Management Network. Available at: www.plantmanagementnetwork.org [Accessed 17 November 2006].
- Neitsch, S.L., et al., 2011. *Soil and Water Assessment Tool theoretical documentation, version 2009*. Temple, TX: Grassland, Soil and Water Research Laboratory, Agricultural Research Service.
- Oeurng, C., Sauvage, S., and Sánchez-Pérez, J.-M., 2010. Temporal variability of nitrate transport through hydrological response during flood events within a large agricultural catchment in south-west France. *Science of the Total Environment*, 409, 140–149. doi:10.1016/j.scitotenv.2010.09.006
- Pikounis, M., et al., 2003. Application of the SWAT model in the Pinos River basin under different land use scenarios. *Global Nest Journal*, 5 (2), 71–79.
- Runkel, R.L., Crawford, C.G., and Cohn, T.A., 2004. *Load estimator (LOADEST): a FORTRAN program for estimating constituent loads in streams and rivers*. Reston, VA: US Geological Survey.
- Sanchezperez, J.M., et al., 2003. The influence of nitrate leaching through unsaturated soil on groundwater pollution in an agricultural area of the Basque country: a case study. *Science of the Total Environment*, 317, 173–187. doi:10.1016/S0048-9697(03)00262-6
- Saxton, K.E. and Rawls, W.J., 2009. *Soil Water Characteristics: Hydraulic properties calculator* [Computational program]. USDA Agricultural Research Service. Version 6.02.74.
- Scanlon, M., 2005. Botany of the potato plant. In: P. Bains, ed. *Guide to commercial potato production on the Canadian prairies*. Alberta: Agriculture and Rural Development of Alberta.
- Schmalz, B., Tavares, F., and Fohrer, N., 2007. Assessment of nutrient entry pathways and dominating hydrological processes in lowland catchments. *Advances in Geosciences*, 11, 107–112. doi:10.5194/adgeo-11-107-2007
- Srinivasan, R., Zhang, X., and Arnold, J., 2010. SWAT ungauged: hydrological budget and crop yield predictions in the upper Mississippi River basin. *Transactions of the ASABE*, 53 (5), 1533–1546. doi:10.13031/2013.34903
- Tyler, K.B., Broadbent, F.E., and Bishop, J.C., 1983. Efficiency of nitrogen uptake by potatoes. *American Potato Journal*, 60 (4), 261–269. doi:10.1007/BF02854276
- Wang, S., et al., 2008. Modelling hydrological response to different land-use and climate change scenarios in the Zamu River basin of northwest China. *Hydrological Processes*, 22, 2502–2510. doi:10.1002/hyp.6846
- Williams, J.R., et al., 1989. The EPIC crop growth model. *Transactions of the ASAE*, 32, 497–511. doi:10.13031/2013.31032
- Winchell, M., et al., 2007. *ArcSWAT interface for SWAT2005—User's guide*. Temple: Blackland Research Center, Texas Agricultural Experiment Station and Grassland, Soil and Water Research Laboratory, USDA Agricultural Research Service.
- Winter, T.C., 1981. Uncertainties in estimating the water balance of lakes. *Journal of the American Water Resources Association*, 17 (1), 82–115. doi:10.1111/j.1752-1688.1981.tb02593.x
- Wriedt, G. and Rode, M., 2006. Modelling nitrate transport and turnover in a lowland catchment system. *Journal of Hydrology*, 328, 157–176. doi:10.1016/j.jhydrol.2005.12.017
- Zhang, Y.B., Zheng, F.L., and Cao, N., 2010. Effect of saturated near surface on nitrate and ammonia nitrogen losses in surface runoff at the loess soil hillslope. *International Journal of Chemical Engineering*, 2010, 1–7.

ANEXO III

Spatial variability representation of the MOHID model results

The current annex provides an example of the kind of result given by the MOHID model. Concretely, it is represented a period (3-Nov-2011/ 9-Nov-2011) with a precipitation event so that its repercussion on variables such as water table depth (Figure A-2), relative water content (Figure A-3), dissolved organic carbon concentration (Figure A-4; A-5), denitrification rate (Figure A-6) and nitrate concentration (Figure A-7; A-8) can be analyzed. It should be considered that the results shown in this annex are not specifically analyzed in the manuscript, but they have been studied in a more general way. However, it has been considered that including them could be interesting due to the lack of this kind of result representation in the literature.

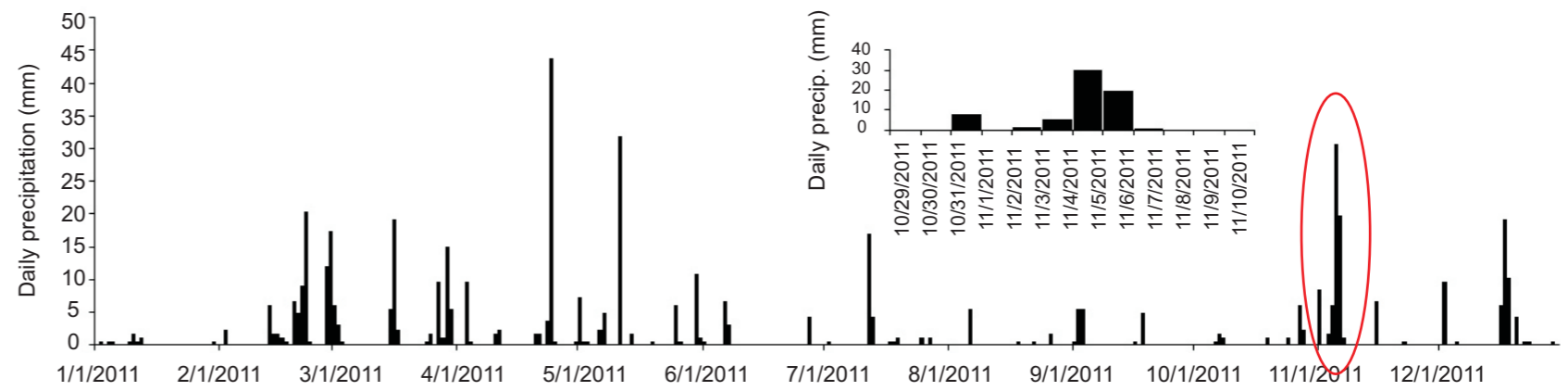


Figure A-1. Daily precipitation read by the MOHID model during year 2011. The period analyzed is highlighted and zoomed.

WATER TABLE DEPTH

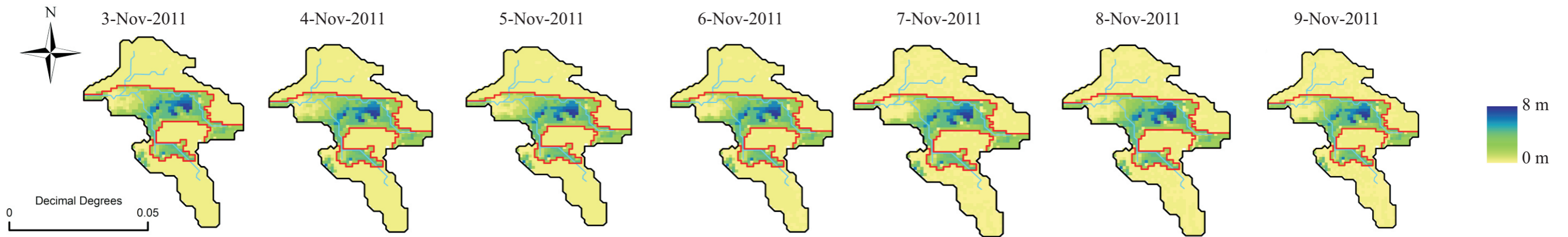


Figure A-2. Simulated temporal evolution of the water table depth (m) during the period 3-Nov-2011/9-Nov-2011.

RELATIVE WATER CONTENT- Layer 11

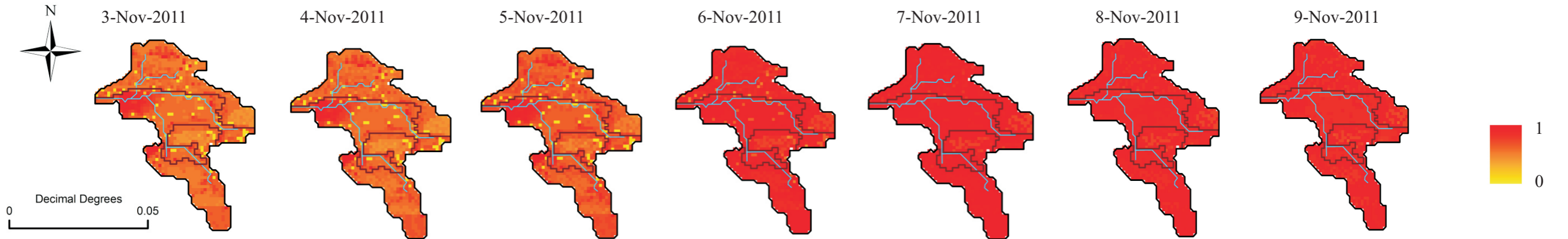


Figure A-3. Simulated temporal evolution of the relative water content ($\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$) during the period 3-Nov-2011/9-Nov-2011 (Layer 11 of the model).

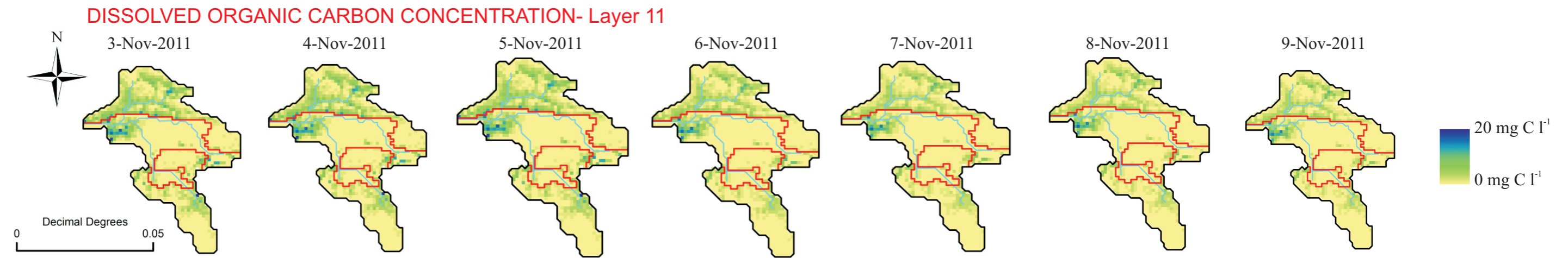


Figure A-4. Simulated temporal evolution of the concentration of dissolved organic carbon (mg C l⁻¹) during the period 3-Nov-2011/9-Nov-2011 (Layer 11 of the model).

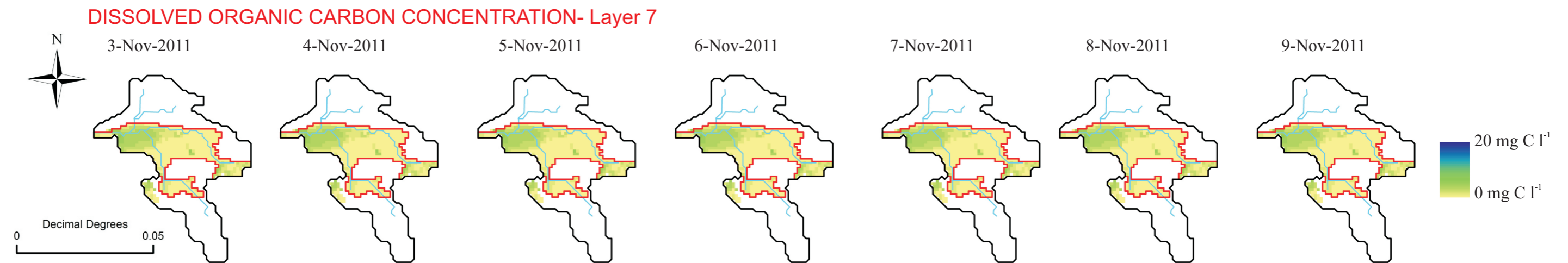


Figure A-5. Simulated temporal evolution of the concentration of dissolved organic carbon (mg C l⁻¹) during the period 3-Nov-2011/9-Nov-2011 (Layer 7 of the model).

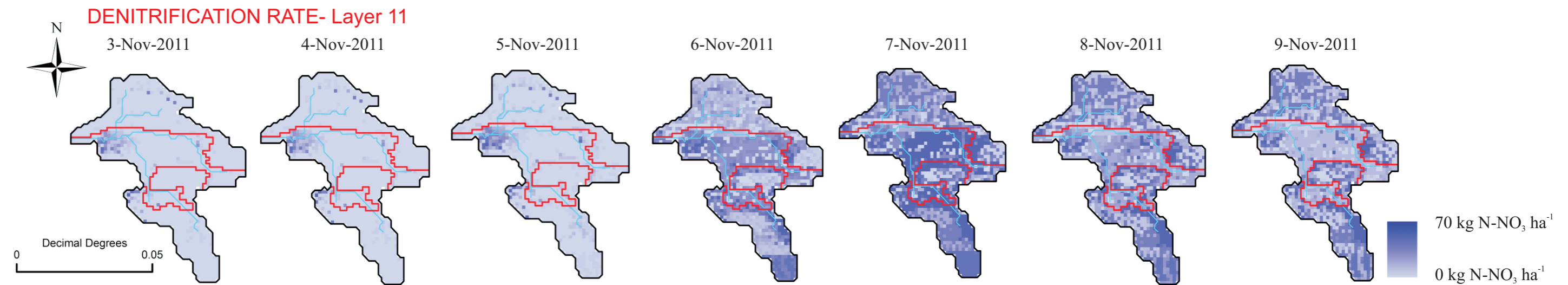


Figure A-6. Simulated temporal evolution of the denitrification rate (kg N-NO₃ ha⁻¹) during the period 3-Nov-2011/9-Nov-2011 (Layer 11 of the model).

NITRATE CONCENTRATION- Layer 11

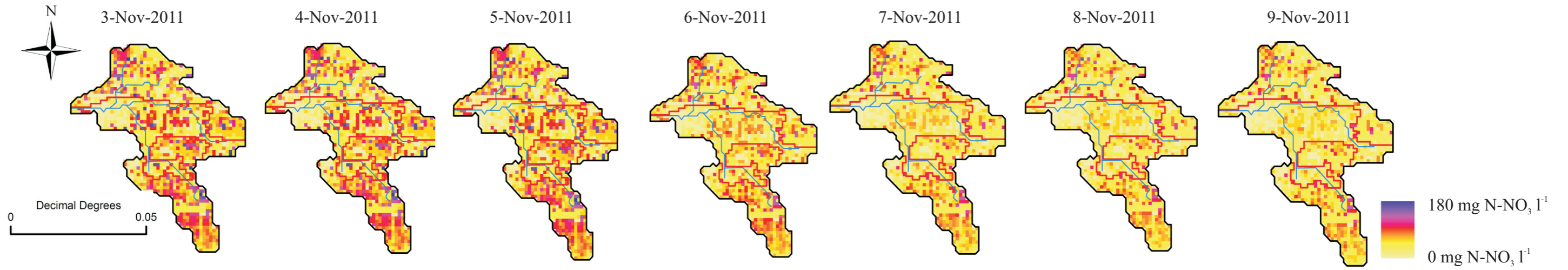


Figure A-7. Simulated temporal evolution of the concentration of nitrate ($\text{mg N-NO}_3 \text{ l}^{-1}$) during the period 3-Nov-2011/9-Nov-2011 (Layer 11 of the model).

NITRATE CONCENTRATION- Layer 7

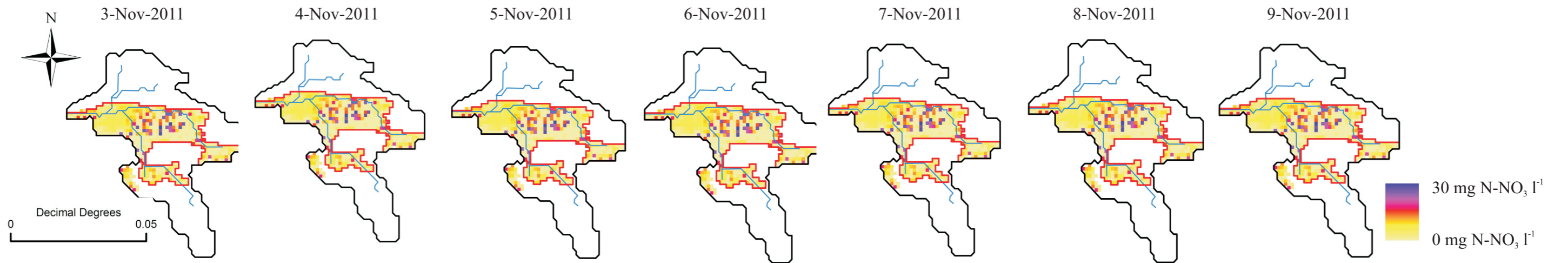


Figure A-8. Simulated temporal evolution of the concentration of nitrate ($\text{mg N-NO}_3 \text{ l}^{-1}$) during the period 3-Nov-2011/9-Nov-2011 (Layer 7 of the model).



La intensificación de la agricultura durante las últimas décadas ha acarreado un importante deterioro de la calidad de los suelos y del agua a consecuencia de una gestión agrícola deficiente en diversos aspectos. Por un lado, las altas dosis de fertilizantes nitrogenados, y, por otro, las prácticas de riego o labranza, han supuesto importantes pérdidas de nitrógeno por lixiviación, contribuyendo al aumento de la concentración de nitrato en los acuíferos y a la eutrofización de masas de aguas superficiales.

Mediante la concienciación de este serio problema para el medioambiente, se han ido implementando una serie de normativas con el objetivo de reducir los efectos de una inadecuada gestión agrícola. Así, en el País Vasco se llevan realizando estudios desde la década de los 80 en relación a la contaminación agrícola de origen difuso sobre las aguas superficiales y subterráneas de la cuenca del río Alegria (Álava-Araba).

Concretamente, la presente Tesis Doctoral enfoca el estudio de los impactos de las prácticas agrícolas sobre las aguas a través de la modelización numérica, mediante distintos códigos numéricos que permiten construir modelos integrados considerando los principales procesos a escala de cuenca. Así, los procesos simulados son aquellos relacionados con la hidrología (incluyendo, obviamente, la dinámica del acuífero), las prácticas agrícolas y la transformación de nutrientes.

La modelización numérica ha permitido simular el impacto de los cambios en las prácticas agrícolas (usos del suelo, dosis de fertilizantes y gestión del riego) sobre la calidad de las aguas y la dinámica del nitrógeno del sistema. Esto ha servido para evidenciar el efecto de los cambios sobre la concentración de nitratos de las aguas, subterráneas y superficiales, y también el lapso temporal que puede discurrir entre el inicio de una práctica de mitigación y la puesta en evidencia de una mejora en la calidad de las aguas.

Además, se han construido diferentes escenarios alternativos de buenas prácticas agrícolas con los que se ha podido analizar su impacto sobre las aguas. Tal y como queda demostrado en esta Tesis Doctoral, los procesos considerados por cada código utilizado y las asunciones tomadas en la construcción de cada modelo hacen que los resultados puedan diferir, en menor o mayor medida, por lo que la consideración de estos aspectos es esencial.

Teniendo en cuenta las limitaciones y posibilidades de la modelización numérica, se concluye que los modelos, utilizados adecuadamente y con una actualización frecuente, suponen una importante herramienta para optimizar la gestión en términos de producción y de mitigación de la contaminación en cuencas cuyo principal uso es el agrícola. De esto resulta que la administración competente en la materia debería incluir la modelización de forma activa en los planes de gestión agrícola.

