

{infiltrodiscR}: Programación en R para la Ciencia del Suelo y la Reproducibilidad como actividad académica

Carolina V. Giraldo¹, Sara E. Acevedo²³, Diego Onna⁴, Carlos A. Bonilla¹⁵⁶

Abstract

La reproducibilidad es un desafío en todas las disciplinas científicas, incluyendo la ciencia del suelo, y se fomenta por las demandas de transparencia de organismos financiadores y gobiernos. La investigación abierta y reproducible en física de suelos puede beneficiar a la comunidad científica. Con un enfoque en prácticas de ciencia abierta, se desarrolló el paquete {infiltrodiscR}, aprovechando el conocimiento previo de R del Laboratorio de Biofísica de Suelos de la Pontificia Universidad Católica de Chile. El paquete facilita el análisis de datos de infiltración, demostrado a través del análisis de cambios en la infiltración utilizando datos publicados. El proceso de publicación del paquete en GitHub, contribuyó al envío de un artículo científico que se encuentra en revisión y a la incorporación de {infiltrodiscR} en la plataforma CRAN, como parte de la actividad académica de los autores.

Palabras clave: Ciencia abierta, Ciencias del suelo, Infiltración, Reproducibilidad.

¿Qué nos motivó a diseñar {infiltrodiscR}?

Las mediciones de infiltración y conductividad hidráulica no saturada del suelo con mini-infiltrómetros de disco son tareas comunes en el laboratorio de Biofísica del Suelo de la Pontificia Universidad Católica de Chile. Inicialmente, se registraban los datos utilizando programas basados en hojas de cálculo, pero el gran volumen de datos generado dificultaba su organización, análisis y reproducción. Aunque las personas que hacen parte del equipo del laboratorio tenían conocimientos previos de R, no existía un repositorio con funciones estándar para el análisis de datos de infiltrómetro. En 2023, los autores se unieron a un programa liderado por Open Life Science para diseñar un proyecto que creara un paquete de R para facilitar el análisis de datos de mini-infiltrómetros de disco a otros usuarios. Basado en la experiencia de programación de los miembros del laboratorio y la necesidad de adoptar una ciencia abierta y reproducible, se desarrolló el paquete {infiltrodiscR}.

{infiltrodiscR} utiliza la relación entre la infiltración acumulada y el tiempo para determinar la conductividad hidráulica no saturada del suelo para una succión específica. La conductividad hidráulica no saturada del suelo se calcula como la relación entre C_1 (la pendiente de la curva de infiltración acumulada vs. la raíz cuadrada del tiempo) y A (que depende de los parámetros de van Genuchten, el radio del disco y la succión aplicada) basándose en la ecuación propuesta por Zhang (1997). Este paquete de R facilita estos

¹ Departamento de Ingeniería Hidráulica y Ambiental, Pontificia Universidad Católica de Chile, Macul, Santiago, Chile

² Facultad de Agronomía y Sistemas Naturales, Pontificia Universidad Católica de Chile, Macul, Santiago, Chile

³ Centro de Desarrollo Urbano Sustentable CEDEUS, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile

⁴ Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, Universidad de Buenos

⁵ Hermiston Agricultural Research and Extension Center, Oregon State University, Hermiston, OR, USA

⁶ Department of Crop and Soil Science, Oregon State University, Corvallis, OR, USA

{infiltrodiscR}: PROGRAMACIÓN EN R PARA LA CIENCIA DEL SUELO Y LA REPRODUCIBILIDAD COMO ACTIVIDAD ACADÉMICA

cálculos y actualmente se encuentra alojado en GitHub (<https://github.com/biofisicasuelos/infiltrodiscR>) y CRAN en la librería **infiltrodiscR**.

El paquete {infiltrodiscR} contiene tres funciones principales:

- **infiltration()**: Calcula la infiltración acumulada y la raíz cuadrada del tiempo utilizando el tiempo y el volumen registrados por el mini-infiltrómetro de disco
- **vg_par()**: Devuelve los parámetros A, no_h y alpha relacionados con los parámetros de van Genuchten desde datos tabulados (van Genuchten, 1980).
- **parameter_A()**: Devuelve el parámetro A calculado a partir de la ecuación basada en el trabajo desarrollado por Zhang (1997).

¿Cómo pasamos de un paquete a una publicación en un artículo científico y a CRAN?

Considerando que varios autores publican artículos científicos sobre el uso de sus paquetes de R para asegurar que sean citados correctamente en investigaciones académicas, y tras haber publicado nuestro paquete en GitHub, decidimos enviar un manuscrito a SoftwareX, una revista que publica trabajos sobre software de código abierto y su aplicación en ciencia e ingeniería. Aunque el artículo les pareció interesante, nos hicieron dos objeciones: 1) no utilizábamos datos publicados por otros autores para demostrar la funcionalidad y reproducibilidad del paquete, y 2) el paquete no estaba en CRAN. Encontrar datos externos fue un desafío, pero logramos identificar una investigación similar con 846 datos (Kelleher et al., 2020) que nos permitió reproducir los resultados con alta precisión. En cuanto a la segunda objeción, inicialmente nos resistimos a subir el paquete a CRAN dado que las directrices de la ciencia abierta promueven la documentación y el control de cambios, lo que llevó a revisiones mayores. Tras ajustar el paquete, lo enviamos a CRAN, que en un principio consideró que el paquete era demasiado específico y pequeño. Sin embargo, finalmente lo aceptaron en julio de 2024. Estas acciones resolvieron las objeciones del manuscrito, y ahora esperamos su aceptación, lo que beneficiará a los autores del presente trabajo, al combinar nuestro trabajo académico con un enfoque de ciencia abierta.



Figura 1. Línea de tiempo desde la utilización de macros de Excel hasta la publicación del artículo científico

{infiltrodiscR}: PROGRAMACIÓN EN R PARA LA CIENCIA DEL SUELO Y LA REPRODUCIBILIDAD COMO ACTIVIDAD ACADÉMICA

Bibliografía

- Zhang R. Determination of Soil Sorptivity and Hydraulic Conductivity from the Disk Infiltrometer. *Soil Sci Soc Am J.* 1997;61(4):1024–30.
- van Genuchten MTh. A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Sci Soc Am J.* 1980;44(5):892–8.
- Kelleher C, Golden HE, Burkholder S, Shuster W. Urban vacant lands impart hydrological benefits across city landscapes. *Nat Commun.* 2020 Mar 26;11(1):1563