

Mechanistic numerical modelling of solute uptake by plant roots

Andre Herman Freire Bezerra

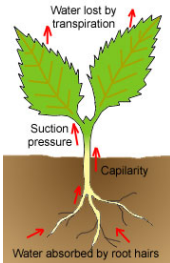
Advisor: Quirijn de Jong van Lier

University of São Paulo

Piracicaba, February 19, 2016



Introdução



Desenvolvimento e produção

≡

transpiração da planta

Estresse (biótico/abiótico)



Fechamento dos estômatos



Alteração na transpiração



Introdução

- ▶ Encontrar um modelo que explique suficientemente bem o fenômeno para o propósito escolhido;
- ▶ Relação número de parâmetros/grau de complexidade do modelo difícil de ser ajustado;
- ▶ Encontrar simplificações que tornem a resolução possível, perdendo o mínimo possível de precisão (realidade X simulação).

Modelagem → entender/simular/prever os fenômenos



melhorar práticas de manejo das culturas



Extração de soluto

Modelos macroscópicos

Considera toda a zona radicular como um componente de extração uniforme.
A extração de água e soluto é um termo “sumidouro” nas equações de balanço de massa.

Modelos microscópicos

Considera uma raiz singular cilíndrica de raio e propriedades de extração uniformes.
A extração de água e solutos são determinadas pelas condições de contorno das equações de balanço de massa à superfície da raiz.



Extração de soluto

Modelos macroscópicos

Considera toda a zona radicular como um componente de extração uniforme.
A extração de água e soluto é um termo “sumidouro” nas equações de balanço de massa.

Modelos microscópicos

Considera uma raiz singular cilíndrica de raio e propriedades de extração uniformes.
A extração de água e solutos são determinadas pelas condições de contorno das equações de balanço de massa à superfície da raiz.

Solução numérica X Solução analítica

Numérica

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^{j+1} \\ C_2^{j+1} \\ C_3^{j+1} \\ \vdots \\ C_{n-1}^{j+1} \\ C_n^{j+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{bmatrix}$$

Analítica

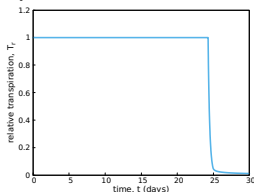
$$\Theta(\mu, \eta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \mu^{\nu} \beta_{\nu}(\mu, \tau, \alpha_n) \exp(-\alpha_n^2 \eta)$$



Soluções existentes

- ▶ Início → soluções analíticas em regime estacionário para o fluxo de água e solutos
- ▶ Computadores → soluções numéricas uni, bi e tridimensionais (regime transiente)
 - ▶ soluções com extração de soluto linear ou não-linear

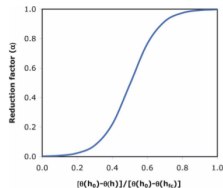
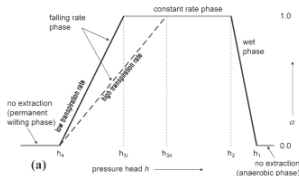
Possibilidade de prever o estresse hídrico e osmótico



Modelos empíricos

Feddes et al. (1978), Homaei (1999), Li et al. (2006)

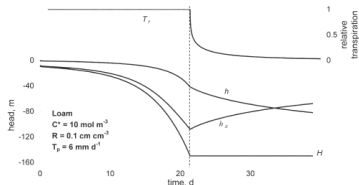
Redução da transpiração → parâmetros empíricos



Modelo mecanístico

De Jong van Lier et al. (2009)

Redução da transpiração → potencial hídrico limitante (LER TRABALHO DE QUIRIJN Q FALA COMO SE OBTER h_{lim})

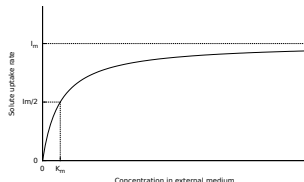


Solução proposta

Modelo microscópico, numérico e mecanístico com extração não-linear de soluto (dependente da concentração do solo)

- ▶ Utilizou-se como base o modelo mecanístico de extração de água e fluxo de soluto proposto por De Jong van Lier et al. (2009),
- ▶ Resolver a Equação de Convecção-Dispersão para o movimento de soluto no solo, considerando fluxos transientes de água e soluto e assumindo uma extração (não-linear) de soluto sendo depende de sua concentração no solo. que resolve numericamente as equações de balanço de massa, porém não considera a extração de soluto e somente o seu movimento em direção à raiz.

- ▶ Buscando-se uma solução também mecanística para a extração de solutos, utilizou-se a equação de Michaelis-Menten como condição de fronteira à superfície da raiz.



Objetivos da Tese

- ▶ Incorporar extração de soluto no modelo de De Jong van Lier et al. (2009);
- ▶ Diferenciar quantitativamente as componentes passiva e ativa da extração de solutos;

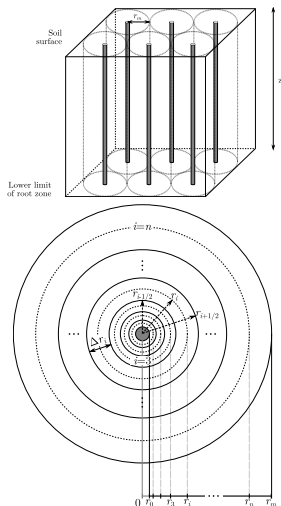
Finalidade

Incorporar o modelo em uma modelo mais completo (SWAP)

MELHORAR O TEXTO (INFORMACOES)



Características do domínio



Equação de Richards

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r K(h) \frac{\partial H}{\partial r} \right)$$

Equação de Convecção-Dispersão

$$r \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial r} \left(r q C \right) + \frac{\partial}{\partial r} \left(r D \frac{\partial C}{\partial r} \right)$$

Condições de contorno em r_0 :

Água:

T_p quando transpiração é potencial

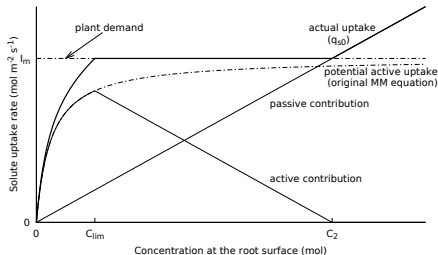
Limitada por $K(\theta)$ quando $T_r < 1$

Soluto:

$$-D(\theta) \frac{\partial C}{\partial r} + q_0 C_0 = q_{s0} = - \frac{F}{2\pi r_0 R z}$$



Condição de cotorno em r_0



Extração de soluto dependente da concentração de soluto no solo (MM equation)

C_{lim} e C_2 calculados analiticamente (não adiciona novos parâmetros)

$$F = \begin{cases} \frac{I_m C_0}{K_m + C_0} + q_0 C_0, & \text{if } C_0 < C_{lim} \\ I_m, & \text{if } C_{lim} \leq C_0 \leq C_2 \\ q_0 C_0, & \text{if } C_0 > C_2 \end{cases}$$

Premissas:

- ▶ Extração por fluxo de massa → passivo
- ▶ Extração por difusão → ativo
- ▶ Parâmetro I_m → demanda da planta por soluto
- ▶ Em C_{lim} a extração é limitada pelo fluxo de soluto



Discretização

- ▶ Solução implícita (backward Euler method)
- ▶ Discretização do espaço → não-constante (Δ_r crescente) → maior precisão (malha mais fina) na zona de maior variação de fluxos
- ▶ Discretização do tempo → variável (de acordo com o número de iterações)

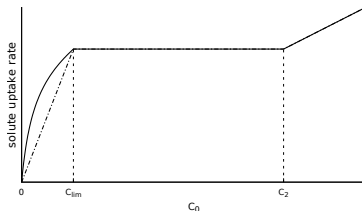


Discretização

- ▶ Solução implícita (backward Euler method)
- ▶ Discretização do espaço → não-constante (Δ_r crescente) → maior precisão (malha mais fina) na zona de maior variação de fluxos
- ▶ Discretização do tempo → variável (de acordo com o número de iterações)

Modelo proposto

- ▶ Extração não-linear (MM Equation) e linear (baseada em MM) em r_0



$$F = \frac{I_m C_0}{K_m + C_0} + q_0 C_0$$

$$F = \beta C_0 = \frac{2I_m}{K_m \pm (K_m^2 + 4I_m K_m / q_0)^{1/2}} C_0$$



Outros modelos (comparação)

Algoritmo numérico da solução analítica de De Willigen and Van Noordwijk (1994) → Extração de soluto em taxa constante

Algoritmo da solução numérica de De Jong van Lier et al. (2009) → Sem extração de soluto

Algoritmo da solução analítica de Cushman (1979) → Extração de soluto dependente da concentração no solo



Cenários

Scenario	R	C_{ini}	T_p	Soil	Ion
1	M	H	H	Loam	K^+
2	M	H	L	Loam	K^+
3	M	L	H	Loam	K^+
4	H	H	H	Loam	K^+
5	L	H	H	Loam	K^+
6	M	H	H	Sand	K^+
7	M	H	H	Clay	K^+
8	M	H	H	Loam	NO_3^-

R : densidade radicular

C_{ini} : concentração inicial de soluto no solo

T_p : transpiração potencial

Parametros de Entradas

Solo, planta e atmosfera.

Saídas

Concentrações de soluto ($C(r)$, $C_0(t)$), potenciais (h , h_p , H) e fluxos ($q(r)$, $q_0(t)$, $q_s(r)$, $q_{s_0}(t)$).



Diferença entre a solução linear e a não-linear

$$\delta_C = \frac{\sum_{x=1}^{x_{end}} CL_x - CNL_x}{\sum_{x=1}^{x_{end}} CL_x}$$

$$\delta_{Ac} = \frac{\sum_{t=1}^{t_{end}} AcL_t - AcNL_t}{\sum_{t=1}^{t_{end}} AcL_t}$$

Saídas Analisadas: $C(r)$, $C_0(t)$ e $Ac(t)$ (também no teste U).



Diferença entre a solução linear e a não-linear

$$\delta_C = \frac{\sum_{x=1}^{x_{end}} CL_x - CNL_x}{\sum_{x=1}^{x_{end}} CL_x}$$

$$\delta_{Ac} = \frac{\sum_{t=1}^{t_{end}} AcL_t - AcNL_t}{\sum_{t=1}^{t_{end}} AcL_t}$$

Saídas Analisadas: $C(r)$, $C_0(t)$ e $Ac(t)$ (também no teste U).

Análise de sensibilidade

Sensibilidade parcial relativa.

$$\eta = \frac{dY/Y}{dP/P}$$

Parâmetros que sofreram variação ($dP/P = 0.01$):

I_m , K_m

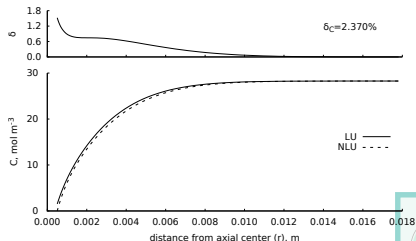
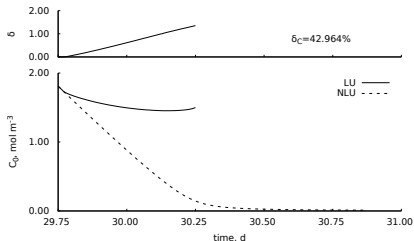
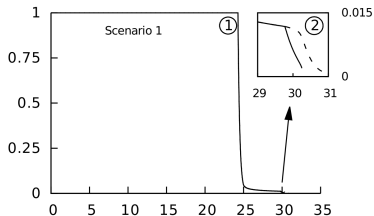
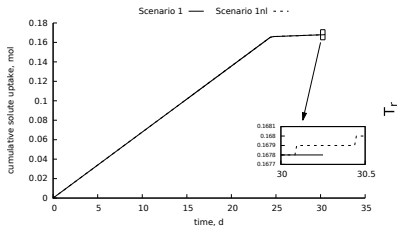
α , n , λ , K_s , θ_r , θ_s

Saídas analisadas:

t_{end} , h_π , h , $\overline{h_\pi}$, \overline{h} , Ac



Linear VS não-linear

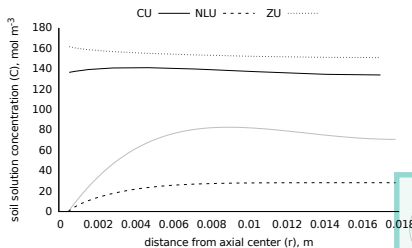
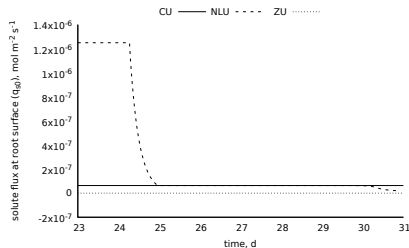
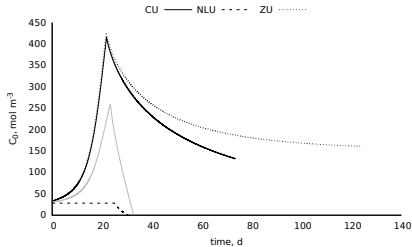
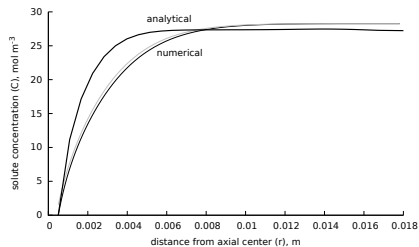


Diferenças significativas somente em $C_0(t) \rightarrow$ NLU é preferido \rightarrow instabilidade, menores Δt

LU \rightarrow preferido quando se deseja usar $A_c(t)$ ou $C(r) \rightarrow$ maiores Δt (estável)



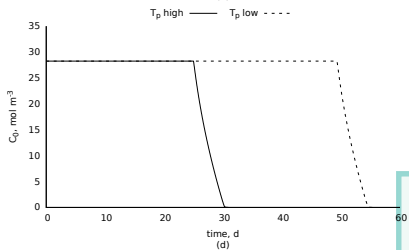
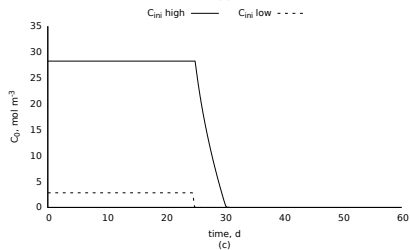
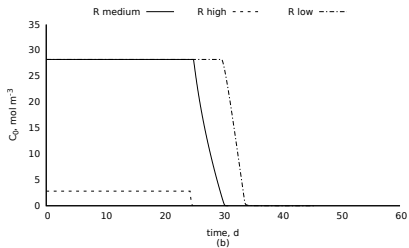
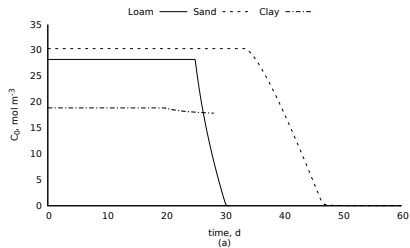
Comparação dos modelos



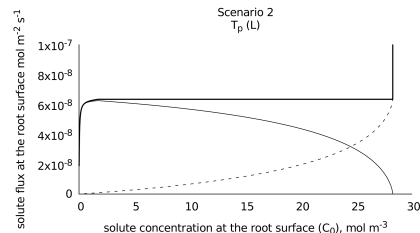
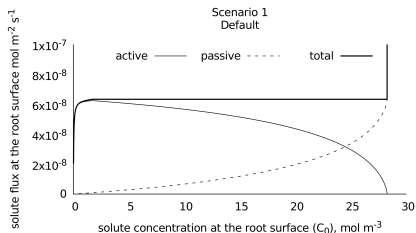
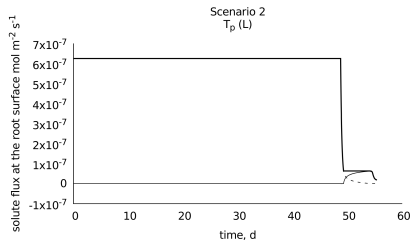
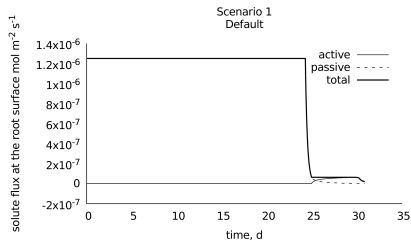
Concentração de soluto dentro da planta não é considerada → elevada extração em altas concentrações



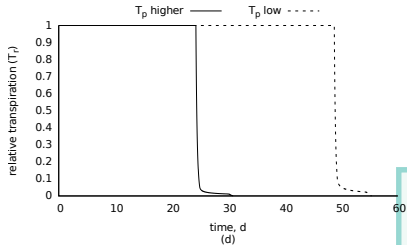
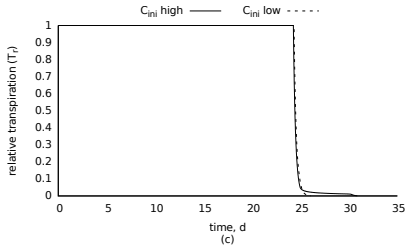
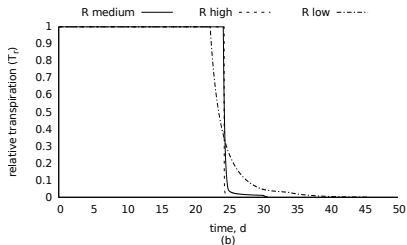
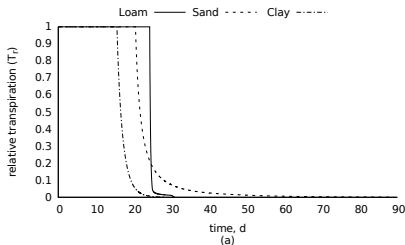
Resultados do modelo



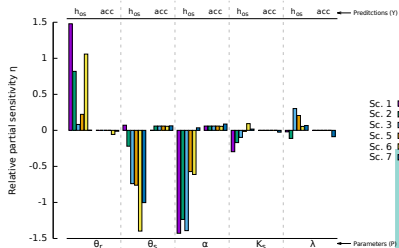
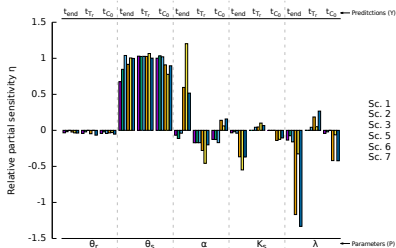
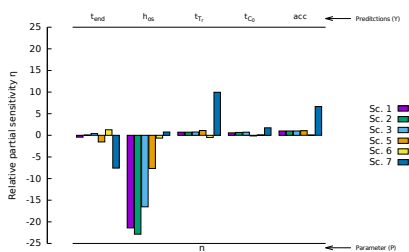
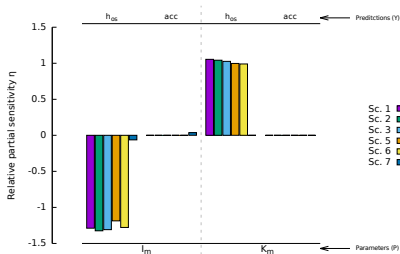
Resultados do modelo



Resultados do modelo



Análise de sensibilidade



Conclusões

- ▶ A solução linear é preferível por ser de mais rápida execução, porém apenas nas predições $Ac(t)$ e $C(r)$.
- ▶ Uma segunda redução na T_r mostrou-se possível devido à redução do fluxo de água para se manter o valor de H_{lim} . C_{lim} está diretamente associado com o fluxo de água e é importante na determinação do estresse combinado (hídrico e osmótico/iônico) em baixas concentrações de soluto no solo.
- ▶ As propriedades hidráulicas do solo, densidade radicular, concentração inicial de soluto e transpiração potencial são fatores que afetam o tempo em que a concentração à superfície da raiz começa a diminuir e o tempo em que a extração ativa é máxima.



Conclusões

- ▶ Os parâmetros mais sensíveis do modelo são:
 θ_r , θ_s , α , I_m e $K_m \rightarrow$ afetam fortemente a concentração de soluto no solo
 $\theta_s \rightarrow$ afeta o tempo em que os valores limitantes de concentração são alcançados
 $n \rightarrow$ afeta todas as saídas, mas principalmente h_π
- ▶ O modelo quantifica as contribuições ativa e passiva da extração de soluto do solo, que podem ser utilizadas para discernir o estresse osmótico do iônico em trabalhos futuros.



Trabalhos futuros

- ▶ Modificações no método de discretização/resolução das equações de balanço de massa afim de se obter soluções estáveis e mais rápidas.
- ▶ Elaborar experimentos controlados com plantas sob situações conhecidas de estresse osmótico e iônico e comparar os resultados com as previsões do modelo.
- ▶ Investigar os mecanismos que atuam e caracterizam a definição da concentração limitante (C_{lim}) aqui teorizada.
- ▶ Considerar a concentração do íon dentro da planta.

