Mechanistic numerical modelling of solute uptake by plant roots

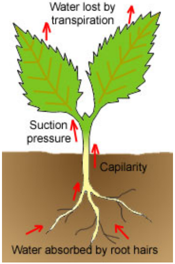
Andre Herman Freire Bezerra

Advisor: Quirijn de Jong van Lier

University of São Paulo

Piracicaba, February 19, 2016

Introdução



Desenvolvimento e produção

$\equiv$

transpiração da planta

Estresse (biótico/abiótico)

$\downarrow$

Fechamento dos estômatos

$\downarrow$

Alteração na transpiração

Introdução

- Encontrar um modelo que explique suficientemente bem o fenomeno 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 $\rightarrow$ entender/simular/prever os fenômenos

$\downarrow$

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 cinlíndrica 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 raíz.

Extração de solute

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 cinlíndrica 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 raíz.

Solução numérica X Solução analítica

Numérica

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

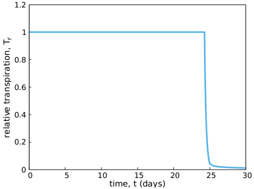
Analítica

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

Soluções existentes

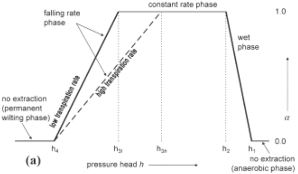
- Início $\rightarrow$ soluções analíticas em regime estacionário para o fluxo de água e solutos
- Computadores $\rightarrow$ soluções numéricas uni, bi e tridimensionais (regime transiente)
  - soluções com extração de soluto linear ou não-linear

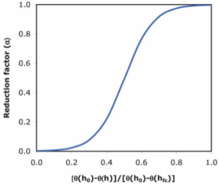
Possibilidade de prever o estresse hídrico e osmótico



Modelos empíricos

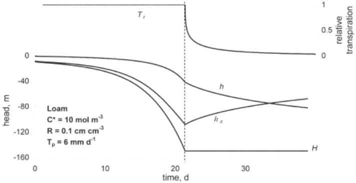
Feddes et al. (1978), Homaee (1999), Li et al. (2006)
Redução da transpiração → parâmetros empíricos





Modelo mecanístico

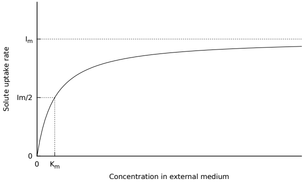
De Jong van Lier et al. (2009)
Redução da transpiração → potencial hídrico limitante (LER TRABALHO DE QUIRIJN Q FALA COMO SE OBTER $h_l im$)



Solução proposta

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

- Utilizou-se como base o modelo mechanístico 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

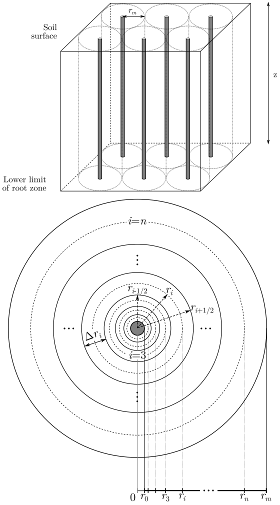
- Incorporar extração de soluto no modelo de De Jong van Lier et al. (2009);
- Diferenciar quantitativamente as componentes passiva e ativa da extração de solutos;

Importância

Incorporar o modelo em uma modelo mais completo (SWAP)

MELHORAR O TEXTO (INFORMACOES)

Características do domínio



Equação de Richards

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

Equação de Convecção-Dispersão

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

Condições de contorno em r_0:

Água:

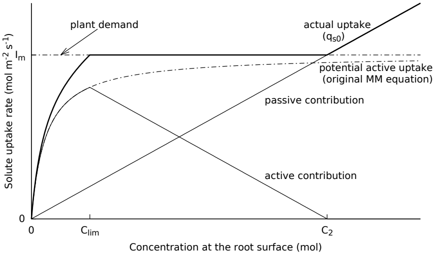
T_p quando transpiração é potencial

Limitada por K(θ) quanto $T_r < 1$

Soluto:

$$-D(\theta)\frac{\partial C}{\partial r} + q_0 C_0 = q_{s_0} = -\frac{F}{2\pi r_0 Rz}$$

Condição de cotorno em r_0



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

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

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

Premissas:

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

Discretização

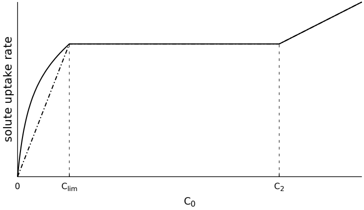
- Solução implícita (backward Euler method)
- Discretização do espaço $\rightarrow$ não-constante (Δ_r crescente) $\rightarrow$ maior precisão (malha mais fina) na zona de maior variação de fluxos
- Discretização do tempo $\rightarrow$ variável (de acordo com o número de iterações)

Discretização

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

Modelo proposto

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



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

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

Outros modelos (comparação)

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

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

Algoritmo da solução analítica de Cushman (1979) $\rightarrow$ 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_pi, 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

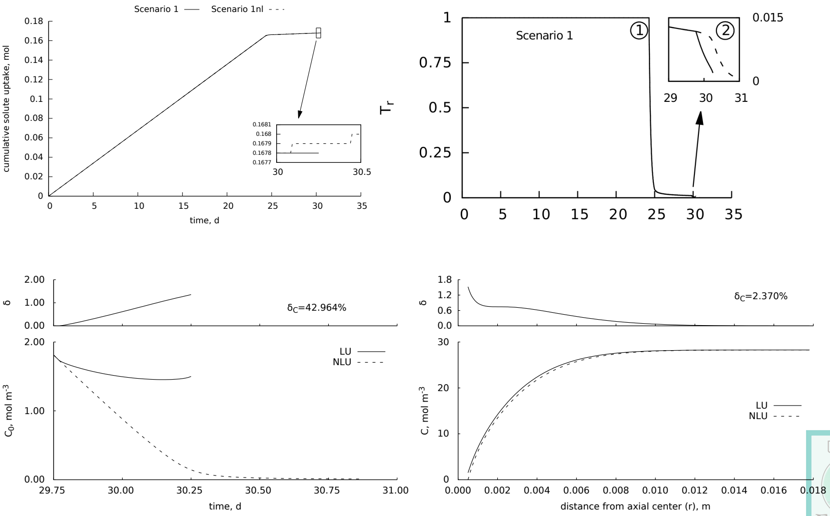
Sensibilidade parcial relativa.

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

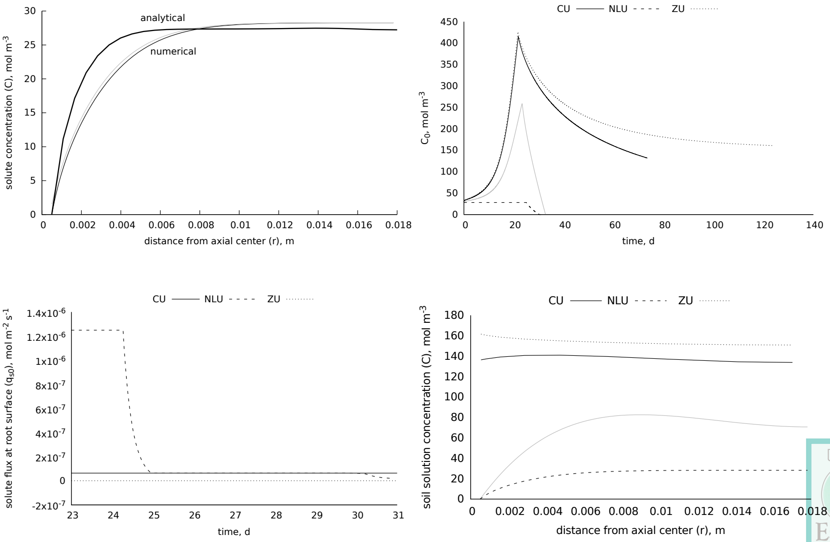
Parâmetros que sofreram variação ($dP/P = 0.01$):
I_m, K_m
α, n, λ, K_s, θ_r, θ_s

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

Linear VS não-linear



Comparação dos modelos



Resultados do modelo

Sensitivity analysis

Conclusions

- Linear and non-linear uptake solutions show good agreement with an analytical solution which also considers a concentration dependent uptake as the boundary condition at the root surface. They are significantly different only when comparing the concentration as a function of time for times where $C_0 < C_{lim}$ (NUP).
- A second reduction in the T_r may occur by a reduction of the solute uptake rate resulting in a reduction of water flux due to the decreasing value of pressure head needed to maintain the limiting value of $H = H_{lim}$. It shows that the limiting value C_{lim} can be an important parameter to determine changes in the combined water and osmotic stress in low concentration situations, suggesting it requires more investigation.
- Soil hydraulic properties, root length density, initial concentration and potential transpiration are factors that change the time that the concentration at the root surface starts to decrease and the time that the active uptake is maximum.

Conclusions

- Quantities that require a careful parameterization are: θ_r, θ_s, α, I_m and K_m, affecting strongly the solute concentration at the root surface at completion of simulation, θ_s affecting the time at wich limiting values of solute concentration are reached, and n which strongly affects all selected predictions, mainly h_π.
- The model showed to be able to quantify the active and passive contributions to the solute uptake, which can be used to distinguish osmotic and ionic stressors in further works.
- The proposed model uses an implicit scheme for the numerical solution of the convection-dispersion, including variable space steps and diffusion coefficients. A more detailed investigation of stability issues for this kind of model would benefit its applicability and is suggested as a future work.