

# Mechanistic numerical modelling of solute uptake by plant roots

Andre Herman Freire Bezerra

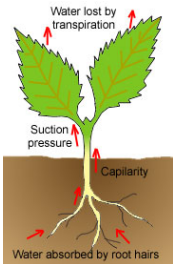
Advisor: Quirijn de Jong van Lier

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

Zona radicular → componente de extração uniforme.

Extração de água e soluto → termo “sumidouro” nas equações de balanço de massa.

## Modelos microscópicos

Raiz singular cilíndrica de raio e propriedades de extração uniformes.

A extração de água e soluto → condições de contorno à superfície da raiz.



# Extração de soluto

## Modelos macroscópicos

Zona radicular → componente de extração uniforme.

Extração de água e soluto → termo “sumidouro” nas equações de balanço de massa.

## Modelos microscópicos

Raiz singular cilíndrica de raio e propriedades de extração uniformes.

A extração de água e soluto → condições de contorno 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

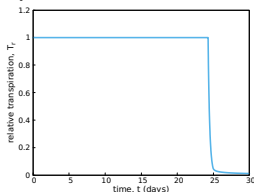
$$\Theta(\mu, \eta) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \mu^{\nu} \beta_{\nu}(\mu, \tau, \alpha_n) \exp(-\alpha_n^2 \eta)$$



# 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

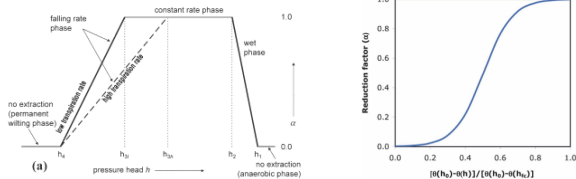
Possibilidade de prever o estresse hídrico e osmótico



## Modelos empíricos

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

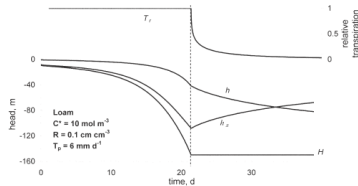
Redução da transpiração → parâmetros empíricos



## Modelo mecanístico

De Jong van Lier et al. (2009)

Redução da transpiração → parâmetros físicos

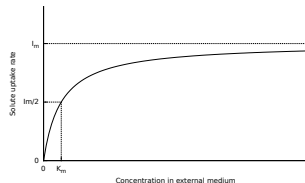


# Solução proposta

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

- ▶ Base → modelo mecanístico de extração de água e movimento de soluto proposto por De Jong van Lier et al. (2009)
- ▶ Resolver a Equação de Convecção-Dispersão para o movimento e extração de soluto no solo, considerando fluxos transientes de água e soluto e assumindo extração de soluto dependente da concentração no solo.

- ▶ 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.



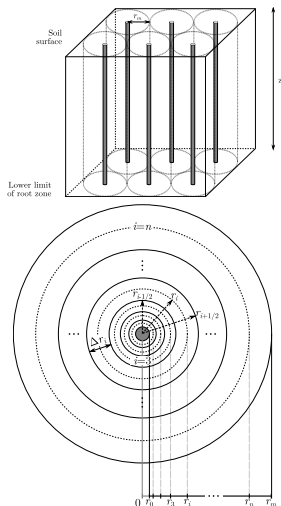


# Objetivos da Tese

- ▶ 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;



# 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

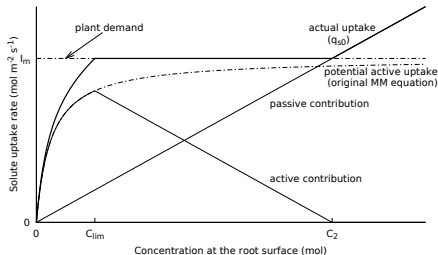
Limitada por  $K(\theta)$  quando  $T_r < 1$

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 ( $\Delta_r$  crescente) → maior precisão (malha mais fina) na zona de maior variação de fluxos
- ▶ Discretização do tempo → variável (de acordo com o número de iterações)

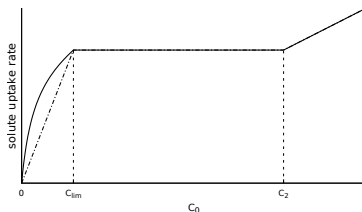


## Discretização

- ▶ Solução implícita (backward Euler method)
- ▶ Discretização do espaço → não-constante ( $\Delta_r$  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 ( $h$ ,  $h_\pi$ ,  $H$ ) 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 ( $dP/P = 0.01$ ):

$I_m$ ,  $K_m$

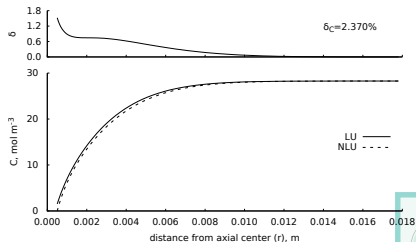
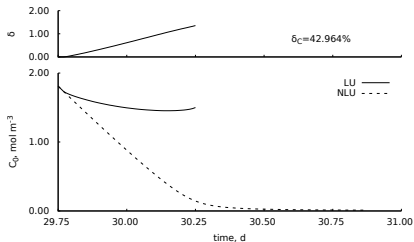
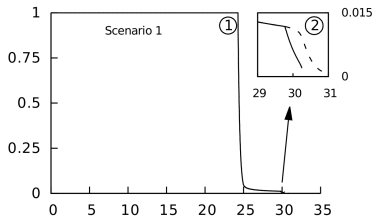
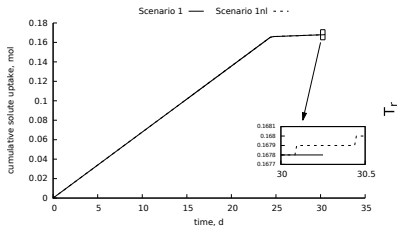
$\alpha$ ,  $n$ ,  $\lambda$ ,  $K_s$ ,  $\theta_r$ ,  $\theta_s$

Saídas analisadas:

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



## Linear VS não-linear

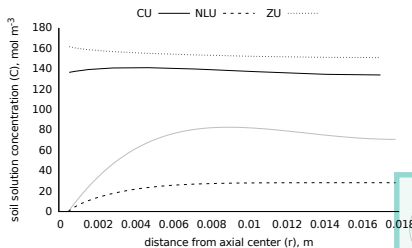
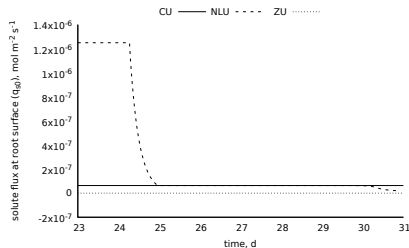
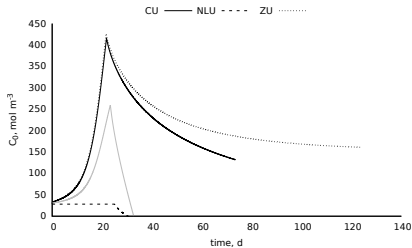
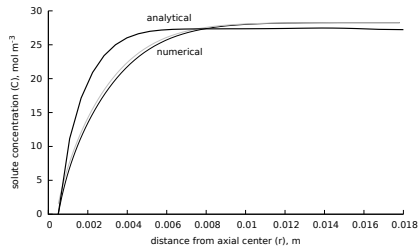


Diferenças significativas somente em  $C_0(t) \rightarrow$  NLU é preferido  $\rightarrow$  instabilidade, menores  $\Delta t$

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



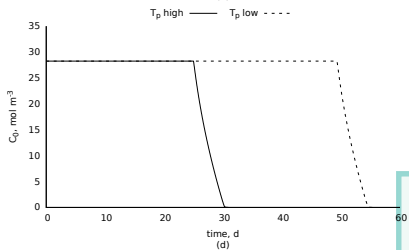
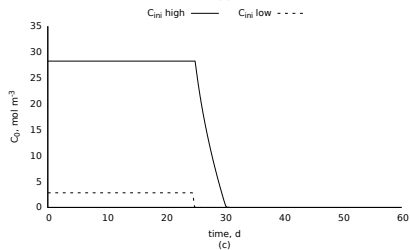
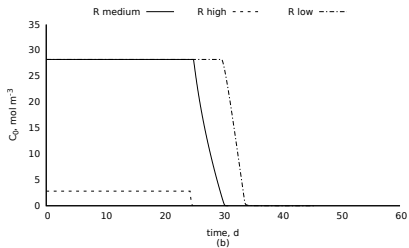
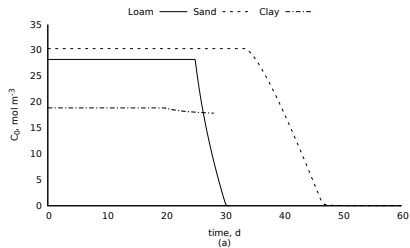
## Comparação dos modelos



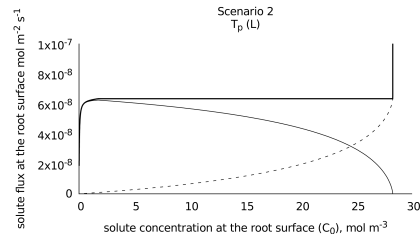
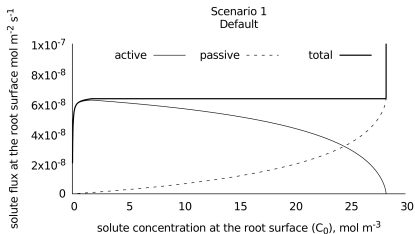
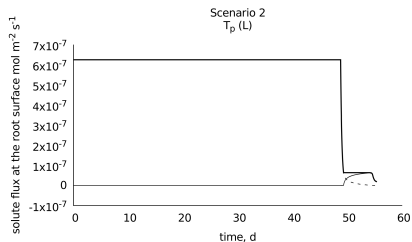
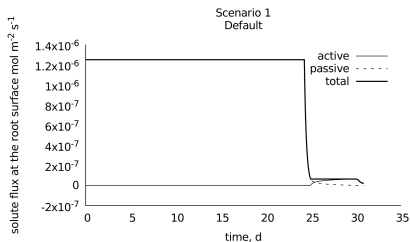
Concentração de soluto dentro da planta não é considerada → elevada extração em altas concentrações



## Resultados do modelo (NLU)



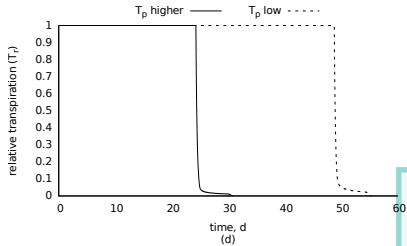
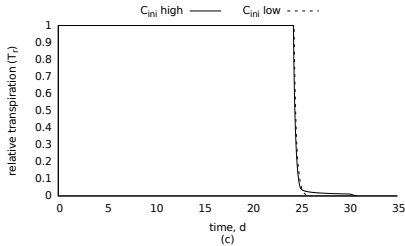
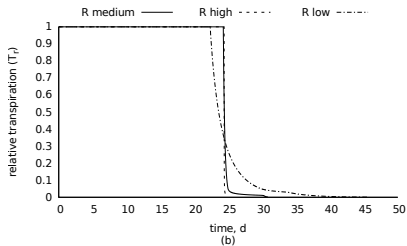
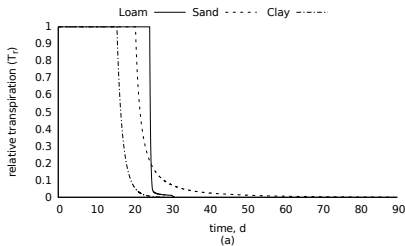
## Resultados do modelo (NLU)



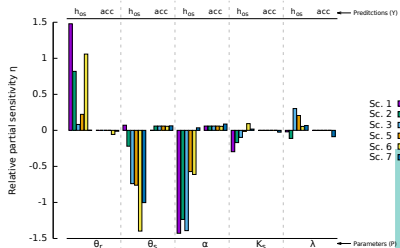
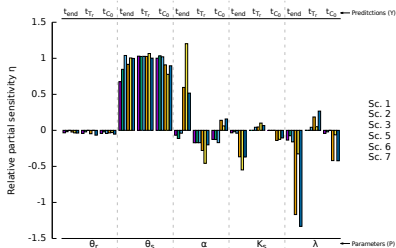
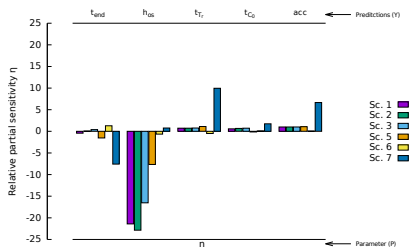
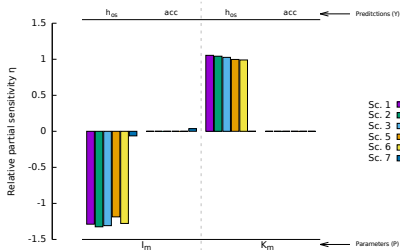
Duração das fases → propriedades do solo, densidade radicular,  $C_{ini}$  e  $T_p$ .



## Resultados do modelo (NLU)



## 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:  
 $\theta_r$ ,  $\theta_s$ ,  $\alpha$ ,  $I_m$  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  $h_\pi$
- ▶ 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.
- ▶ Incorporar o modelo proposto num modelo agroecohidrológico (SWAP)

