

A simple article

A. U. Thor

1. Processos clássicos de modelagem

Não é razoável esperar que exista um procedimento sistemático *universal*, para o desenvolvimento e construção de modelos. Na realidade, poder-se-ia até afirmar que o procedimento de construção de modelos constitui uma “arte”. Na primeira seção deste capítulo sobre modelagem, analisaremos alguns pontos levantados por Beck, ao considerar problemas associados ao desenvolvimento de modelos. As idéias de M. B. Beck encontram-se publicadas no livro “Mathematical Modelling of Water Quality Streams, Lakes and Reservoirs”, Ed. Gerald Orlob, Wyley, 1983.

Podemos, inicialmente, distinguir as duas seguintes questões:

a) De que forma, seria possível determinar *um conjunto de relações aproximadas* para a descrição das propriedades de um dado sistema, conhecida uma teoria geral para o mesmo?

b) Como verificar se as aproximações contidas no modelo são adequadas para descrever o comportamento experimental observado?

Estas duas questões, como será discutido adiante, exibem a razão pela qual o processo de modelagem se divide naturalmente em duas partes:

Em uma primeira etapa, a partir de uma teoria geral, seleciona-se e combina-se uma série de relações (um modelo específico) que, supõe-se, possa descrever um dado sistema. Esta etapa é realizada *antes* de qualquer experimento de campo.

A etapa seguinte consiste em estabelecer uma forma de avaliar a qualidade, ou não, do modelo escolhido, para descrever o comportamento observado experimentalmente. Deste teste de validade, decorre a busca do aperfeiçoamento do modelo, fazendo uso de uma coleção de dados experimentais (calibração do modelo, validação).

Em geral na construção do modelo são adotados os seguintes passos:

<i>A priori</i>	<i>A posteriori</i>
Conceituação	Calibração/verificação
Escolha do tipo de modelo	Validação
Aspectos computacionais	

1.1 Conceituação

É necessário distinguir entre os diversos grupos de *variáveis*:

a) um conjunto de variáveis representadas pelo vetor $\mathbf{d}(\mathbf{r}; t)$; associadas a *perturbações externas conhecidas*. Tais perturbações são bem estabelecidas e conhecidas exper-

imentalmente. Supondo que o sistema em estudo seja constituído por uma certa massa de água, poderíamos citar, como exemplos de tais perturbações: concentrações de nitrogênio, suspensões sólidas, variações na demanda de oxigênio de origem biológica etc.;

b) um conjunto de variáveis $\mathbf{x}(\mathbf{r}; t)$; representando variáveis externas *não controláveis e sem possibilidade de medida*. A característica principal de tal grupo de variáveis é a sua *estocasticidade*. Para o exemplo do estudo de uma certa massa de água, podemos lidar com variáveis externas não controláveis como a taxa anual de fósforo orgânico, proveniente de fontes difusas na massa de água em questão;

c) *variáveis de estado* $\mathbf{c}(\mathbf{r}; t)$; que caracterizam o sistema e estão associadas às suas propriedades fundamentais; em geral, tais propriedades dependem da posição no espaço e do instante de tempo considerados;

d) variáveis $\mathbf{c}^0(\mathbf{r}; t)$; correspondendo às *variáveis de saída*, resposta do sistema às perturbações externas deterministas ou estocásticas. Observe-se que, em geral, a relação entre $\mathbf{c}(\mathbf{r}; t)$ e $\mathbf{c}^0(\mathbf{r}; t)$ não é trivial; por exemplo, uma medida da quantidade de fósforo pode envolver este elemento presente em três objetos distintos: em células de algas, no zooplankton e em materiais associados aos detritos; as três variáveis podem estar envolvidas na dinâmica do sistema;

e) a última categoria de variáveis, $\mathbf{e}(\mathbf{r}; t)$; está associada a *erros de medida* e possui um caráter *essencialmente estocástico*;

Finalmente, resta considerar os parâmetros do modelo, incluídos em um vetor $\mathbf{p}(\mathbf{r}; t)$. Por exemplo, a *taxa de aeração* ou as *constantes de cinética química* são parâmetros de um modelo.

1.2 Escolha do tipo de modelo

Após ter apresentado, na subseção anterior, as diversas categorias de variáveis, passemos agora à discussão a respeito dos diversos tipos de modelo. Em geral, os modelos são classificados nas seguintes categorias:

a) dependendo do tipo de variáveis envolvidas, os modelos podem ser classificados em modelos *contínuos* e modelos *discretizados*; no primeiro caso, as variáveis (quantidades definidas nos itens de a) até e) da subseção anterior), são funções contínuas de \mathbf{r} e de t . Modelos contínuos são muito naturais nas descrições de massa de fluídos, em particular de água ou de fenômenos meteorológicos; tais modelos envolvem equações diferenciais (ordinárias ou parciais), sendo mais precisos na descrição dos sistemas, porém, em geral, muito mais difíceis de resolver. Frequentemente, os sistemas são considerados como constituídos por agregados, em cada um dos quais são considerados os valores médios de certas quantidades; desta forma, as grandezas são consideradas uniformes dentro de um dado volume do espaço das variáveis independentes, levando a um modelo discretizado. Modelos discretizados envolvem equações a diferenças; nestas, é usual considerar intervalos de tempo e de espaço coerentes com os métodos de medida;

b) dependendo de como as variáveis são envolvidas nas equações que descrevem o sistema, os modelos são classificados em modelos *lineares* ou *não lineares*. Em geral, tanto os modelos contínuos quanto os discretizados são modelos não lineares; freqüentemente, entretanto, admitem solução exata em sua aproximação linear. A grande vantagem dos modelos lineares é que tais modelos satisfazem o princípio de superposição de soluções, segundo o qual, supondo que a resposta do modelo O_A está relacionada à perturbação externa I_A , enquanto que uma resposta O_B está relacionada à perturbação I_B , pode-se concluir que, para uma entrada sob forma de combinação linear, $a^0 I_A + a^{00} I_B$; onde a^0 e a^{00} são constantes, a resposta do sistema será dada por $a^0 O_A + a^{00} O_B$;

c) se o modelo envolver alguma quantidade estocástica ou aleatória, o modelo é dito *estocástico*; caso contrário, diz-se que o modelo é *determinístico*. Um modelo estocástico reduz-se a um modelo determinístico, toda vez que as entradas estocásticas ou os erros aleatórios de medida se reduzem a zero, i.é, usando a notação da subseção anterior, quando $\langle I_r ; t \rangle = 0$ e $\langle O_r ; t \rangle = 0$; para todos os valores de I_r e de t ; além disso, assume-se que os parâmetros $\bar{\theta}$ sejam conhecidos exatamente e não são dados por uma distribuição de probabilidade. Convém notar que, em tal situação, espera-se que a resposta futura do sistema seja completamente definida pelo estado inicial do sistema e pela evolução temporal das perturbações (previsibilidade);

d) dependendo do tipo de raciocínio envolvido, fala-se em *modelo internamente descritivo*, quando é próximo ao processo de raciocínio dedutivo; por outro lado, diz-se que um modelo é do tipo *modelo caixa preta*, quando aproxima-se de um raciocínio indutivo. Enquanto os modelos internamente descritivos caracterizam a forma através da qual as entradas se acoplam aos estados do sistema, e estes últimos entre si e com as saídas, os modelos do tipo caixa preta traduzem apenas quais efeitos da entrada se traduzem em alterações da resposta do sistema.

Modelos dinâmicos em estado estacionário

Usualmente, o analista de ecossistemas procura uma aproximação estacionária para a descrição do sistema; isto se obtém assumindo que as variáveis de estado e os parâmetros sejam independentes do tempo. Um exemplo clássico de estado estacionário é fornecido pelo caso em que as variações espaciais médias da qualidade da água de um sistema de rios são calculadas por uma média invariante com relação ao tempo de descargas de águas servidas, de temperaturas e de condições de taxa débito. No sentido estrito do termo, se todas as variáveis são mantidas independentes do tempo, *exceto a taxa de débito da descarga*, então trata-se de um modelo dinâmico. Uma descarga, variando com o tempo, implica que a qualidade da água em *qualquer ponto fixado no espaço* não se encontra em estado estacionário. Um outro exemplo típico de configuração dinâmica consiste em estudar, em função do tempo, em escala de anos, a resposta de um sistema ecológico lacustre, após a instalação em sítio vizinho, de uma estação de retirada de nutrientes a partir de uma estação

de tratamento de águas servidas.

Análise da sensibilidade *a priori*

A questão da análise da sensibilidade *a priori* é abordada na investigação a respeito da adequação do modelo considerado, mesmo na ausência de dados experimentais com os quais se possa comparar o modelo em estudo. Esta questão pode introduzir a necessidade de se rever o modelo conceitual adotado. Note-se que, em certos casos, a análise de sensibilidade pode detectar um processo de *feedback* durante os processos de construção *a priori* ou *a posteriori* do modelo.

O ponto principal desta análise envolve a sensibilidade das previsões do modelo a mudanças dos parâmetros \bar{c}_j . Por definição, o coeficiente de sensibilidade associado à mudança da variável de estado i do sistema, em resposta à mudança Φ_j do j -ésimo parâmetro, é definida por:

$$S_{ij} = \frac{\mu \Phi_{c_i}}{\bar{c}_i} = \frac{\bar{A}_j}{\bar{c}_j} \quad (1)$$

Esta definição envolve uma renormalização através de \bar{c}_i e de \bar{c}_j ; estas quantidades correspondem à resposta \bar{c}_i do sistema respectivamente ao parâmetro \bar{c}_j . As variações das variáveis de estado e dos parâmetros são supostamente pequenas; S_{ij} indica ao construtor de modelos que um determinado parâmetro não tem significado, se $S_{ij} \cong 0$ ou, então, se uma pequena alteração no parâmetro induz uma *instabilidade* na estrutura do modelo. Evidentemente, a análise de estabilidade pode dar indicações da possibilidade de se efetuar a *calibração* do modelo.

1.3 Calibração e verificação

O objetivo principal da calibração do modelo e da sua verificação é a obtenção de estimativas \hat{c} para os parâmetros do modelo e também comparar uma previsão \hat{c}^0 das respostas do modelo com as respostas c^0 ; *observadas experimentalmente*.

O problema da calibração pode ser formulado mais rigorosamente como segue:

Dado um conjunto de pontos experimentais, incluindo os valores de entrada d e os valores das respostas c^0 ; *obtidas experimentalmente*, queremos determinar valores para os parâmetros \bar{c} , assim como especificar as variáveis de estado do modelo, escolhidos para caracterizar o comportamento do sistema.

Diante da complexidade considerável de sistemas microbiológicos /ecológicos, procede a pergunta de que forma pode-se aplicar de maneira eficiente as técnicas de validação e de calibração mencionadas acima. Vamos dividir o sistema em blocos distintos: o bloco I inclui a microbiologia e a bioquímica do sistema; este bloco define uma escala muito específica, pois um alto grau de *detalhe microscópico* é necessário. No bloco II, *são incluídas* características mais macroscópicas do comportamento. Por exemplo considera-se o pH e a temperatura da água; tais variáveis devem *influenciar o que se passa a nível bioquímico*, com características microscópicas.

Em geral, a maior parte do bloco I é descrito por variáveis do tipo c_i ; cujo acesso ex-

perimental é muito difícil. Por oposição, as variáveis do bloco II, facilmente mensuráveis, são definidas por C_m : Alguns exemplos concretos de tais variáveis são a *quantidade* de *oxigênio químico* necessário, as *concentrações de clorofila e sólidos em suspensão*.

Finalmente, introduz-se o bloco III, correspondendo ao meio ambiente em que se encontra o sistema em estudo. Neste bloco, encontram-se as perturbações não controláveis, descritas pelas variáveis ϵ ; tais variáveis interagem com aquelas mais determinísticas incluídas nos blocos I e II. No bloco III, estão incluídos também os *instrumentos de medida*, os quais introduzem *erros experimentais* ϵ . Em conclusão, no bloco III, incluímos as origens dos “ruídos” e as incertezas experimentais típicas do sistema.

1.4 Validação de modelos ecológicos

Nesta subseção, apresentaremos uma série de definições correspondentes ao conceito de validação de modelos ecológicos, estabelecidas por E. Rykiel Jr., em 1996.

a) *Verificação*

Por definição, verificação consiste na demonstração de que o formalismo do modelo é correto.

Existem dois tipos de erros ocorridos na verificação: *lógicos* e *mecânicos*. Os *erros* chamados de *mecânicos* correspondem a erros de programação ou de precisão do método numérico utilizado, no sentido mais pedestre do termo, e incluem a utilização inadequada dos conceitos matemáticos envolvidos. Por outro lado, os *erros lógicos*, mais complexos de serem detectados, correspondem à lógica interna do programa. Convém lembrar que determinados tipos de erro ocorrem apenas em circunstâncias muito especiais, e, portanto, fogem à rotina.

A verificação avalia, em nível rigoroso e confiável, se as idéias desenvolvidas para o funcionamento do ecossistema foram incorporadas no programa de computador ou no formalismo matemático. No caso de programas extensos, torna-se difícil verificar se o programa não implica erros na maioria de circunstâncias de operação. Além disto, as modificações no programa correspondem apenas a efeitos explicitamente desejados.

b) *Calibração*

Por calibração, entendemos estimar e ajustar os parâmetros do modelo, assim como as constantes, de tal forma a melhorar a concordância entre as saídas do modelo e os dados experimentais disponíveis.

Em outras palavras, a calibração consiste na etapa de tornar o modelo o mais consistente possível com os dados, a partir dos quais os parâmetros são extraídos.

c) *Validação*

Validação é a demonstração de que um dado modelo, dentro do seu domínio de aplicabilidade, possui um espectro satisfatório de precisão, compatível com a aplicação prevista para o modelo.

Devemos constatar que esta demonstração indica que o modelo é aceitável para uso, o que não quer dizer em de forma nenhuma que ele contenha alguma verdade absoluta, nem mesmo que seja o melhor modelo disponível. Colocado em termos operacionais, esta demonstração envolve a comparação dos dados modelizados com aqueles obtidos pela observação ou medidos no sistema real.

d) *Credibilidade*

Credibilidade consiste em um grau suficientemente grande de confiança, na validade do modelo, que justifique a sua utilização em pesquisa e tomadas de decisão.

Note-se que o conceito de credibilidade envolve um julgamento subjetivo, e portanto, não pode ser quantificado em nenhum sentido absoluto.

(Chapter head:) Aspectos termodinâmicos clássicos

2. Entropia Clássica à la Toulouse-Pfeuty

Uma definição de *entropia*, que permite naturalmente sua conexão com as complexões, pode ser muito útil na descrição qualitativa de alguns fenômenos, ainda que o conceito seja mais adequado à mecânica estatística de equilíbrio.

Partimos do conceito fundamental de *função de partição* Z de um sistema, descrito por uma função hamiltoniana H , contendo os ingredientes para a descrição de sua dinâmica. Por definição, a função de partição se escreve:

$$Z = \text{tr} \exp [i^{-1} H] g ; \quad (2)$$

onde $i^{-1} = \frac{1}{k_B T}$, sendo k_B a constante de Boltzmann. A operação $\text{tr} f:::g$ é definida como a soma dos elementos da diagonal da matriz $\exp [i^{-1} H]$, calculados usando um sistema completo qualquer de estados, não necessariamente auto-estados de H .

Esta operação é extremamente difícil de ser efetuada para sistemas envolvendo alto grau de complexidade. Entretanto, vamos supor que o sistema em estudo, para temperaturas abaixo de uma temperatura de transição T_t , exiba uma ordem descrita por um parâmetro de ordem, que representaremos por $m^{\dagger} r$. O parâmetro de ordem se anula para temperaturas acima de T_t , sendo diferente de zero para temperaturas inferiores a T_t . Foi introduzida, por generalidade, uma dependência no vetor posição r , tendo em vista sistemas não uniformes. O vetor r corresponde ao centro de um cubo de tamanho adequado, para que, dentro dele, o valor numérico do parâmetro m varie pouco.

O ponto fundamental desta abordagem consiste em supor que a *energia* E possa ser escrita em termos do parâmetro $m^{\dagger} r$, da seguinte maneira formal: $E = E[m^{\dagger} r]$.

Visto tratar-se de uma soma sobre os diversos estados, a execução do traço pode ser escrita em termos de uma integral funcional sobre todos os possíveis valores do parâmetro de ordem $m^{\dagger} r$, tendo-se o cuidado de computar o *número de configurações* microscópicas, $C[m^{\dagger} r]$, *correspondentes a cada valor deste parâmetro*; este é o número de complexões. Assim, resulta para a função de partição:

$$Z = \int Dm(\dagger r) C[m(\dagger r)] \exp \int_i^{-1} E[m(\dagger r)] g ; \quad (3)$$

Este resultado significa que a função de partição é dada pela *soma dos diversos valores* das exponenciais, *ponderados pelo número de complexões*.

Introduzindo-se a identidade: $x^{-1} = \exp [\ln x]^{-1} = \exp [-k_B T \ln x]$, podemos reescrever a função de partição sob a forma:

$$\begin{aligned} Z &= \int Dm(\dagger r) \exp \int_i^{-1} k_B T \ln C[m(\dagger r)] g \exp \int_i^{-1} E[m(\dagger r)] g = \\ &= \int Dm(\dagger r) \exp \int_i^{-1} [f E[m(\dagger r)] - k_B T \ln C[m(\dagger r)]] g ; \end{aligned}$$

Finalmente, introduzindo a seguinte definição de *entropia*:

$$S[m(\dagger r)] = k_B \ln C[m(\dagger r)] g ; \quad (4)$$

e, conseqüentemente, a *energia livre de Gibbs*:

$$F[m(\frac{1}{r})] = E[m(\frac{1}{r})] + TS[m(\frac{1}{r})]; \quad (5)$$

obtemos a função de partição sob a forma:

$$Z = \sum Dm(\frac{1}{r}) \exp \left[-\frac{E}{kT} - F[m(\frac{1}{r})] \right]; \quad (6)$$

Na definição de entropia estabelecida em (4), observamos que esta é dada pelo produto da constante de Boltzmann pelo logaritmo natural do número de complexões; esta conexão da entropia com as complexões é análoga à conhecida conexão da entropia com o número de configurações.

3. Exergia: definição geral à la Jorgensen

Sobre o conceito de *exergia*, suas propriedades e aplicações, adotamos como texto de base o trabalho de S. Jorgensen, em seu livro “Integration of Ecosystem Theories: a Pattern”, Kluwer Academic Publishers, 1992.

As células, formando as unidades básicas dos ecossistemas, são o resultado de uma longa evolução, partindo de uma “sopa orgânica” até as protocélulas e daí em direção a células ainda mais complexas. Estas envolvem processos extremamente complexos de síntese, além de processos de desenvolvimento do conteúdo de informação.

Tais capacidades são preservadas pelo uso de funções e códigos genéticos, estes assegurando que nenhuma informação relevante seja perdida durante os processos, por mais complexos que sejam.

Cabe aqui um comentário “histórico”: após o aparecimento da “sopa orgânica”, que devia caracterizar o que existia na Terra há alguns 3600 a 4000 milhões de anos atrás, iniciou-se um processo aleatório de produção de materiais orgânicos. Essa dinâmica realizou-se por um processo de tentativa e erro, até determinar caminhos implicando simultaneamente em organização e em afastamento crescente do equilíbrio termodinâmico que correspondia à “sopa orgânica”. Conforme será definido a seguir, o aumento crescente de *negentropia*, responsável pelo afastamento do equilíbrio, foi a força motriz do aparecimento de novos caminhos. Mostraremos também que a *exergia* mede a distância com relação à “sopa orgânica”, em termos energéticos *latu sensu*.

Seja um ecossistema *A* e o “reservatório” ou “meio ambiente” *A*₀. A título de exemplo, consideremos um lago e suas interações com ambientes poluentes, ações meteorológicas, ou ainda, através da interface com ecossistemas localizados na vizinhança etc. Este “reservatório” *A*₀ é suposto homogêneo e grande comparado com *A*. Vamos introduzir as *variáveis intensivas*, definidas como aquelas que independem do tamanho do sistema; por exemplo, temperatura, pressão e potenciais químicos. Por oposição, *variáveis extensivas* são a energia, o volume, a entropia, o número de moléculas de diferentes espécies químicas etc. As quantidades referentes ao “meio ambiente” *A*₀ serão indicadas com um subscrito 0, enquanto que aquelas do ecossistema *A* serão indicadas sem subscrito.

Uma hipótese fundamental consiste em assumir que o *sistema combinado* *A* + *A*₀ é um *sistema isolado*, ou seja, que a definição do meio ambiente foi feita adequadamente, de

modo que todas as interações e trocas de massa e energia estão contidas dentro do volume definido pela superfície \mathcal{A} gerada pela união de A e A_0 . Esta hipótese pressupõe as seguintes igualdades envolvendo a energia interna U (U_0), o trabalho W , o volume V (V_0) e o número de espécies químicas N^c (N_0^c), onde $c = 1; 2; \dots$ rotula cada espécie distinta presente:

$$\begin{aligned} dU + dU_0 + dW &= 0 \\ dV + dV_0 &= 0 \\ dN^c + dN_0^c &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

Como estamos considerando A *pequeno comparado com* A_0 fazemos a hipótese de que as grandezas intensivas de A_0 não são afetadas por A , o que implica em:

$$dT_0 = dp_0 = d\mu_0^c = 0; \quad (8)$$

sendo T_0 a temperatura, p_0 a pressão, e μ_0^c o potencial químico, todos do reservatório.

Partindo da relação termodinâmica clássica:

$$dS = \frac{1}{T} dU + p dV + \sum_c \mu^c dN^c;$$

pode-se calcular a diferencial da entropia do meio ambiente, como segue:

$$\begin{aligned} dS_0 &= \frac{1}{T_0} dU_0 + p_0 dV_0 + \sum_c \mu_0^c dN_0^c = \\ &= \sum_i \frac{1}{T_0} dU + p_0 dV + \sum_c \mu_0^c dN^c + \frac{dW}{T_0}; \end{aligned} \quad (9)$$

onde, no último passo, fizemos uso das eqs.(7), que decorreram do fato de o conjunto (ecossistema + meio ambiente) constituir um sistema isolado, além daquelas (8), devidas ao fato que $A \ll A_0$.

Para a *diferencial da entropia total*, tem-se, portanto:

$$dS_{tot} = dS_0 + dS = \sum_i \frac{1}{T_0} dU + p_0 dV + \sum_c \mu_0^c dN^c + \frac{dW}{T_0} + dS; \quad (10)$$

Se agora introduzirmos a definição de exergia (E_x):

$$E_x = U + p_0 V - T_0 S + \sum_c \mu_0^c N^c \quad (11)$$

ou sua diferencial $dE_x = dU + p_0 dV - T_0 dS + \sum_c \mu_0^c dN^c$, podemos escrever:

$$dS_{tot} = \sum_i \frac{1}{T_0} (dE_x + dW); \quad (12)$$

Consideremos agora que o processo termodinâmico, entre o ecossistema e o reservatório, ocorra sem troca de trabalho, isto é, $dW = 0$. Nestas condições, enquanto a entropia total passa de um valor S para um valor de equilíbrio S_{equi} , a exergia muda de

um valor finito E_x para um valor nulo (este fato será mostrado mais adiante); então:

$$\int_S^{S_{\text{equi}}} dS_{\text{tot}} = \int_{E_x}^{E_0} \frac{1}{T_0} dE_x ; \quad (13)$$

onde, definindo negentropia NE como o desvio da entropia com relação à de equilíbrio, isto é, a diferença entre a entropia do sistema, quando em equilíbrio com o meio ambiente, e a entropia do sistema nas condições observadas:

$$NE = S_{\text{equi}} - S ; \quad (14)$$

estabelecemos, após efetuar as integrais acima,

$$E_x = T_0 (S_{\text{equi}} - S) ; \quad (15)$$

portanto a conexão entre a exergia e a negentropia é obtida sob a forma:

$$E_x = T_0 NE \quad (16)$$

Para chegar a este resultado, usamos acima o fato de que *no equilíbrio a exergia se anula*; isto se mostra como segue. Substituindo, na definição de exergia, a energia interna U , e fazendo uso da identidade termodinâmica alternativa $U = TS - pV + \sum_c \mu_c N_c$, a expressão para a exergia fica reescrita sob a forma

$$E_x = (T - T_0)S - (p - p_0)V + \sum_c (\mu_c - \mu_0^c) N_c ; \quad (17)$$

onde, lembrando nossa hipótese de que no equilíbrio tem-se $T = T_0$, $p = p_0$ e $\mu_c = \mu_0^c$, concluímos que, no equilíbrio, tem-se $E_x = 0$, isto é, *a exergia se anula no equilíbrio*.

4. Quarta lei da termodinâmica

5. ou lei ecológica da termodinâmica

Consideremos um sistema recebendo um fluxo de exergia. Um tal sistema *afasta-se o máximo possível do equilíbrio termodinâmico, de forma a aumentar o máximo possível a sua exergia*. Dentre todas as combinações e processos possíveis, oferecidos pelo sistema como forma de utilizar este fluxo de exergia, a organização escolhida será aquela que, dentro das condições de contorno e perturbações existentes, oferecer a maior exergia. Este é exatamente o teor da Proposição 1, de Jorgensen, estabelecida na Sec. 2.1, e está relacionado com o conceito de complexões, exposto na Sec. 4.1 (entropia de Toulouse-Pfeuty).

A quarta lei ou lei ecológica tem este último nome para enfatizar a sua aplicação à ecologia; entretanto, ela pode ser aplicada em outros contextos. Esta lei sugere uma abordagem moderna da *teoria de Darwin*, estabelecendo uma ponte entre esta teoria e o *contexto termodinâmico*.

O fluxo de energia através do sistema permite a construção de compostos bioquímicos complexos. O ponto fundamental é que *energia e compostos orgânicos simples* são transformados em *complexas moléculas bioquímicas*. Este fato é obviamente *consistente com a primeira e com a segunda leis da termodinâmica*. Entretanto, a natureza fornece inúmeros caminhos possíveis para estes processos, caminhos esses que estão em competição. A quarta lei *seleciona processos*, entre aqueles *compatíveis com as condições de contorno*, para os quais a exergia cresce o máximo.

Os processos são extremamente complicados, pois dependem de grande quantidade de fatores, alguns dos quais citaremos a seguir:

- no mínimo 20 compostos orgânicos;
- competição com outros caminhos possíveis;
- temperatura;
- luz, para caminhos de fotossíntese;
- capacidade de utilização de *meios combinados*; a escolha ocorre não apenas entre os vários caminhos bioquímicos, mas também entre as várias combinações de caminhos;
- as condições variam com o espaço e com o tempo; isto implica que a história do sistema também exerce um papel na escolha da organização que fornece a maior exergia.

Em síntese:

a) A conservação e o desenvolvimento da biomassa são extremamente importantes para arquivar o nível de informação já obtido. Sem essa capacidade, seria impossível explicar a taxa de evolução.

b) Existe espaço para a “sobrevivência” de muitos caminhos e a competição entre estes possíveis caminhos é muito complexa.

c) Tudo está ligado a tudo dentro de um ecossistema; conseqüentemente é necessário considerar um ecossistema como um todo. A questão é determinar qual a combinação de caminhos que melhor pode utilizar as capacidades deste todo.

6. Emergia ou energia embutida

Este conceito foi introduzido por E. P. Odum, no livro “Descrição de ecossistemas”, Editora Guanabara Koogan S.A., original em inglês: “Basic Ecology”, 1983, tradução de Christopher J. Tribe. Tal conceito pretende levar em conta a energia necessária à formação de organismos, envolvendo diversos graus de nutrientes.

Emergias de diversos tipos e quantidades podem ser convertidas em emergias equivalentes, multiplicando-se pelo fator de escala adequado. Por exemplo, um peixe, um zooplâncton e um fitoplâncton podem ser comparados; para isto, seu conteúdo energético é multiplicado pela razão de transformação da energia solar.

7. Termodinâmica de não equilíbrio

Nesta seção sobre a termodinâmica de não equilíbrio, assim como nas subseções que a compõem, adotaremos as formulações clássicas de G. Nicolis e Y. Prigogine, com ênfase em reações químicas, localizadas nos seguintes livros: “Exploring Complexity: an introduction”, W. H. Freeman and Company, N. York, 1989, e “Self-organization in non-equilibrium systems”, John Wiley & Sons, N. York, 1977.

7.1 Reações químicas: equações de evolução em presença de termos de fonte

Os sistemas químicos fornecem um exemplo típico de dinâmica regida simultaneamente por *processos de difusão* e por termos de *fonte*.

Suponhamos uma reação descrita em termos de densidades de massa \bar{m}_i , correspondentes aos constituintes $i = 1, \dots, n$. A equação geral de movimento para a densidade de massa \bar{m}_i do constituinte i se escreve:

$$\frac{\partial \bar{m}_i}{\partial t} = \text{div } \mathbf{J}_i + \mathcal{R}_i \quad ; \quad (18)$$

onde a corrente \mathbf{J}_i inclui dois tipos de contribuições:

a) a *corrente de convecção*, $\mathbf{J}_i^{\text{convec}}$, que reflete o deslocamento de \bar{m}_i com a velocidade \mathbf{v} de convecção do fluido, dada por

$$\mathbf{J}_i^{\text{convec}} = \bar{m}_i \mathbf{v} \quad (19)$$

b) a *corrente difusiva*, $\mathbf{J}_i^{\text{difusiva}}$, que leva em conta a difusão dos diversos constituintes. O principal efeito da difusão é o de *amortecer desvios da composição da mistura* com relação à distribuição *uniforme*. Tais efeitos são descritos com boa aproximação através de *gradientes espaciais* das densidades \bar{m}_i . Sabe-se também que outra origem de tais correntes é constituída pelos *gradientes de temperatura*; portanto, a forma geral da corrente difusiva é

$$\mathbf{J}_i^{\text{difusiva}} = - \sum_j D_{ij} \nabla \bar{m}_j - \Theta \nabla T \quad ; \quad (20)$$

onde D_{ij} é a matriz de difusão, cujos elementos são todos positivos, e Θ é o coeficiente de *difusão térmica*.

Em alguns casos de interesse experimental, é possível introduzir algumas simplificações, como segue. Por exemplo, se as concentrações dos constituintes quimicamente ativos forem fracas com relação ao solvente, pode-se desprezar a existência de acoplamentos entre as diversas contribuições da corrente de difusão, o que leva à lei de Fick,

caracterizada por uma matriz de difusão diagonal :

$$J_i^{\text{difusiva}} = -D_i \nabla \cdot \bar{n}_i \quad (21)$$

Nesta última equação, D_i é o coeficiente de difusão da substância química i dentro do meio.

Assim, o primeiro termo no membro direito da equação (18) deverá ser substituído por

$$\sum_i \text{div} \bar{n}_i \quad (22)$$

Até este ponto, foram feitas considerações de ordem eminentemente mecânica; resta agora deduzir, para reações químicas, os termos de *fonte* \mathcal{A}_i que aparecem na equação de movimento (18). A massa do constituinte i contida no elemento de volume pode aumentar ou diminuir, dependendo se o constituinte em questão está sendo produzido ou consumido pela reação química.

Para descrever os fenômenos de reações químicas são necessárias algumas definições:

- a) $w_{\frac{1}{2}}$ representa a taxa de reação por unidade de volume da particular reação química $\frac{1}{2}$; em estudo, da qual participa o constituinte i . Uma definição alternativa consiste em dizer que $w_{\frac{1}{2}}$ é a *freqüência relativa* de colisão entre as moléculas que participam da reação $\frac{1}{2}$;
- b) m_i é a massa da molécula do reagente i ;
- c) $\nu_{i\frac{1}{2}}$ é o coeficiente estequiométrico do constituinte i relativo à reação $\frac{1}{2}$: Em mais detalhe, se $\nu_{i\frac{1}{2}} > 0$; então $\nu_{i\frac{1}{2}}$ é o número de moléculas i produzidas pela reação $\frac{1}{2}$. Por oposição, se $\nu_{i\frac{1}{2}} < 0$; seu módulo corresponde ao número de moléculas i consumidas pela reação $\frac{1}{2}$.

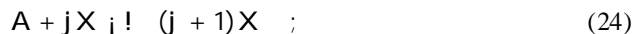
Partindo-se destas definições, o termo de *fonte* pode ser escrito em termos da soma sobre todas as reações $\frac{1}{2}$ presentes, isto é:

$$\mathcal{A}_i = \sum_{\frac{1}{2}} \nu_{i\frac{1}{2}} m_i w_{\frac{1}{2}} \quad (23)$$

restando ainda determinar o valor de $w_{\frac{1}{2}}$, na equação (23).

Consideraremos, aqui, o caso particular de soluções ideais de reagentes, em que as *freqüências de colisão* são proporcionais aos *produtos de densidades* \bar{n}_i ; esta idéia corresponde à lei de ação de massas.

Seja, por exemplo, a reação:



indicando que, da colisão de j moléculas do reagente X com uma molécula A ; resultem $j+1$ moléculas de X . A probabilidade não condicionada de se ter j moléculas X é dada por \bar{n}_X^j . Note-se que não estamos usando mais a barra sobre as densidades, visto que, aqui, não ocorrerá confusão com a notação associada às diversas reações químicas. A probabilidade de se ter a configuração inicial é então:

$$\text{Prob} = \bar{n}_A \bar{n}_X^j$$

Espera-se que a taxa de reação seja proporcional a esta probabilidade, com uma constante k que pode até ser *dependente da temperatura*:

$$w = k(T) \bar{n}_A \bar{n}_X^j \quad (25)$$

Para esta reação específica, as estequiometrias para as variações de X e de A são re-

ativamente 1 e -1 (a quantidade de X cresce por uma unidade e de A decresce igualmente por uma unidade); nestas condições, obtemos para os termos de fonte:

$$\dot{X} = +m_X \dot{k} \dot{w}_A \dot{w}_X^j \quad (26)$$

$$\dot{A} = -j m_A \dot{k} \dot{w}_A \dot{w}_X^j \quad (27)$$

As equações (26) e (27) expressam as reações químicas em termos das densidades de composição, sob forma polinomial.

Uma expressão geral, para uma reação química \dot{w} , pode ser apresentada como segue:

$$\begin{aligned} w_{\dot{w}} &= w_p(\overline{w}_1; \overline{w}_2; \overline{w}_3; \dots; \overline{w}_n) = \\ &= k_{\dot{w}} \prod_{i=1}^n (\overline{w}_i)^{\circ_{i\dot{w}}} \end{aligned} \quad (28)$$

onde $\circ_{i\dot{w}}$ é o número de moléculas do tipo i envolvidas na reação \dot{w} . Evidentemente a constante de reação $k_{\dot{w}}$ pode depender, além da temperatura, de outros parâmetros físicos, tais como a pressão, o pH, a presença ou não de catalizadores etc; se representarmos por $f_{s,i}$ todos estes parâmetros, esta dependência para a taxa de reação por unidade de volume pode ser escrita sob a forma

$$w_{\dot{w}}(\overline{w}_1; \overline{w}_2; \overline{w}_3; \dots; \overline{w}_n; j_{s,1}; j_{s,2}; j_{s,3}; \dots; j_{s,n}) ; \quad (29)$$

onde concluímos que o segundo termo na equação (18) deve ser substituído por

$$\sum_{\dot{w}} \dot{w}_{\dot{w}} \prod_{i=1}^n (\overline{w}_i)^{\circ_{i\dot{w}}} (f_{s,i}^{j_{s,i}}) ; \quad (30)$$

Em conclusão, das equações (23) e (30), a equação geral (18); para as reações químicas se escreve:

$$\frac{\partial \overline{w}_i}{\partial t} = \sum_{\dot{w}} \text{div} \left(\overline{w}_i \dot{w}_{\dot{w}} \right) - D_i \nabla^2 \overline{w}_i + \Theta \nabla \cdot \mathbf{T} + \sum_{\dot{w}} \circ_{i\dot{w}} \dot{w}_{\dot{w}} (f_{s,i}^{j_{s,i}}) \quad (31)$$

onde $f_{s,i}^{j_{s,i}}$ representa o conjunto de valores $\overline{w}_1; \overline{w}_2; \overline{w}_3; \dots; \overline{w}_n$ para as densidades, enquanto que $f_{s,i}^{j_{s,i}}$ representa os valores $j_{s,1}; j_{s,2}; j_{s,3}; \dots; j_{s,n}$, dos parâmetros.

No caso particular em que se pode desprezar a convecção assim como gradientes de temperatura, obtém-se as equações gerais de reação-difusão:

$$\frac{\partial \overline{w}_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 \overline{w}_i + \sum_{\dot{w}} \circ_{i\dot{w}} \dot{w}_{\dot{w}} (f_{s,i}^{j_{s,i}}) ; \quad (32)$$

para $i = 1; 2; 3; \dots; n$:

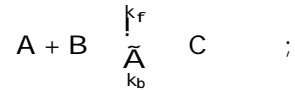
Os estudos destas equações diferenciais não lineares, em particular a estabilidade das soluções (uniformes ou não), assim como a existência de bifurcações, é uma das mais interessantes aplicações desta teoria à ecologia.

7.2 Reações químicas de interesse no estudo de sistemas caóticos

No estudo das reações químicas, a reação de Belousov-Zhabotinsky tem tido destaque, devido a importantes fatos que a caracterizam. Trata-se de uma reação química que pode

ser modelada por um conjunto de equações diferenciais não lineares acopladas.

Um exemplo de tal reação é estabelecida abaixo:



que se descreve através da seguinte modelagem matemática:

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= -k_f AB + k_b C - r(A - A^0) \\ \frac{dB}{dt} &= -k_f AB + k_b C - r(B - B^0) \\ \frac{dC}{dt} &= +k_f AB - k_b C + rC^0 \end{aligned} \quad (33)$$

Nestas equações, A^0 , B^0 e C^0 são as concentrações dos produtos químicos na entrada do reator e r é a taxa de fluxo.

Estas equações podem ser generalizadas para N espécies químicas com concentrações $X_i(t)$; $i = 1; 2; 3; \dots; N$, como segue:

$$dX_i/dt = g_i(fX_j, g) - r(X_i - X_i^0) ; \quad (34)$$

As funções $g_i(fX_j, g)$ envolvem termos não lineares da forma X_i^2 ou ainda $X_i X_j$ e usualmente não se consideram termos de ordem igual ou superior a três.

As transições do sistema dinâmico são analisadas em termos de r . Para $r \neq 0$, o sistema tende ao equilíbrio termodinâmico. Por outro lado, para r muito grande, os produtos químicos não dispõem de tempo suficiente para reagir e são extraídos do reator pela janela indicada. A dinâmica de interesse ocorre nas regiões intermediárias do parâmetro r . Outros parâmetros de controle são a temperatura do reator e as concentrações de entrada X_i^0 .

7.3 Sistemas abertos

Nosso objetivo, nesta subseção, é o de estabelecer a definição de sistemas abertos em geral e de sistemas abertos em equilíbrio mecânico.

Inicialmente, é necessário introduzir os seguintes conceitos:

a) *produção de entropia* dS_i ; devido aos processos irreversíveis no interior do sistema; em equilíbrio, tem-se $dS_i = 0$, e a segunda lei da Termodinâmica determina $dS_i \geq 0$;

b) *fluxo de entropia* dS_e ; devido a trocas de matéria e energia com o meio ambiente; em sistemas fechados, tem-se $dS_e = 0$.

As diferenciais da entropia referem-se ao intervalo de tempo dt : Para a diferencial da entropia total, temos, portanto:

$$dS = dS_i + dS_e \quad (35)$$

O grande resultado conceitual para sistemas abertos é a possível existência de um fluxo dS_e finito de entropia; conseqüentemente, para sistemas fechados, temos sempre $dS \geq 0$.

Note-se a forma clássica de se expressar, baseada na tradição dos ecologistas.

Para simplificar a definição de um sistema aberto em equilíbrio mecânico, e poder comparar com a seção anterior, vamos supor que o sistema seja constituído por uma mis-

tura reativa de n constituintes dentro de um volume de reação V , limitado pela superfície fechada S (na notação anterior o reator possui volume V). Os constituintes são as substâncias: X_1, X_2, \dots, X_n .

Acrescentamos uma série de hipóteses para simplificar a descrição:

- a) o sistema é mantido à temperatura T constante e as condições de contorno são supostas independentes do tempo;
- b) não existem forças externas aplicadas ao sistema nem existe um fluxo global de massa;
- c) não existem interfaces no interior do volume V .

Pode-se definir um livre caminho médio, descrevendo as colisões entre constituintes, em termos das reações químicas. Assume-se, então, que as densidades

$$\rho_i = \frac{m_i}{V}$$

variam pouco em função da posição r , isto é,

$$\rho_i(r; t) \approx \rho_i(t);$$

espacialmente constante dentro da *escala do livre caminho médio*, restando apenas a dependência temporal.

A equação para o balanço de massa neste caso é dada por:

$$\frac{dm}{dt} = \text{fluxo através da superfície } S = \frac{dm_e}{dt};$$

visto que toda a variação da massa total m supõe estar associada ao fluxo de massa através da superfície do sistema.

(Part head:) APLICAÇÕES A ECOSISTEMAS

(Chapter head:) Procedimentos de modelagem

8. Abordagens recentes para a modelagem

Os procedimentos mais recentes de modelagem de ecossistemas devem-se a Sven Jørgensen, em *Ecological Modelling*, 78 (1995): 101-115.

As aplicações de cálculos da *exergia* para organismos mais complexos, desenvolvidos até então, baseavam-se em simples considerações de termodinâmica tradicional. Tais procedimentos não levavam em conta explicitamente o nível de organização dos sistemas considerados.

Um dos métodos, que pretendemos apresentar, tem a sua base na *informação termodinâmica associada aos genes*. Uma questão ainda em aberto consiste em responder de que forma as teorias disponíveis poderiam melhorar os procedimentos de modelagem, de tal forma que incluam mais propriedades biológicas.

O ponto central dessas tentativas pode ser uma extensão, ao nível dos ecossistemas, da teoria elaborada por Darwin em 1859, com vistas a sua aplicação em modelagem. Resumidamente, a teoria de Darwin tem sua base no nível dos organismos e das espécies. Aqueles que disponham de propriedades as mais adequadas às condições existentes, incluindo aquelas associadas a outras espécies, deverão sobreviver. A escala envolvida depende do

sistema sob estudo; se for necessário considerar a luta pela sobrevivência, envolvendo todas as espécies habitando o ecossistema, então o problema tem de ser considerado na escala do ecossistema.

A *exergia* representa a energia biogeoquímica do sistema, e, como apresentado no Capítulo 3 desta monografia, inclui a *energia de organização* ou alternativamente, de *informação*. Propõe-se que a exergia forneça a medida adequada da sobrevivência e crescimento dos organismos, ao nível do sistema como um todo. Não obstante, algumas questões ainda permanecem em aberto e, nesta seção, pretende-se, através do uso do *código genético*, poder estimar a quantidade de informação incluída nos organismos.

Vamos adotar, para o cálculo da exergia, a seguinte definição:

$$E_X = R:T: \sum_{i=0}^N c_i \log \frac{c_i}{c_i^{eq}} + (c_i - c_i^{eq}) \quad ; \quad (36)$$

onde R é a constante dos gases, T é a temperatura, e as quantidades c_i correspondem à *concentração*, no ecossistema, do componente i . Por definição, o índice $i=0$ corresponde às componentes inorgânicas do sistema considerado. Por outro lado, c_i^{eq} corresponde, em equilíbrio termodinâmico, à concentração do componente i . Trata-se, agora, de determinar as quantidades c_i^{eq} .

Suponhamos a *matéria orgânica morta*; para esta, vamos adotar o índice $i=1$. Na ausência de vida, vamos admitir válida a expressão termodinâmica clássica:

$$\frac{c_1}{c_1^{eq}} = \exp \left[- \frac{\mu_1 - \mu_1^{eq}}{RT} \right] \quad ; \quad (37)$$

Na equação (37); a letra μ é adotada para o potencial químico. A diferença $\mu_1 - \mu_1^{eq}$ corresponde à *matéria orgânica*, como por exemplo detritos, que constituem uma mistura de carboidratos, gorduras e proteínas. Resta definir as quantidades de equilíbrio c_1^{eq} ; isto pode ser feito partindo-se da definição de probabilidade P_1 ; de encontrar o componente i em equilíbrio termodinâmico:

$$P_i = \frac{c_i^{eq}}{\sum_{i=0}^N c_i^{eq}} \quad ; \quad (38)$$

donde vemos que, para se estimar P_1 ; é necessário determinar a razão entre c_1^{eq} e a *concentração total*. Verifica-se que a *componente inorgânica* c_0 é a *dominante* e, portanto, podemos reescrever a eq. (38); de tal forma que

$$P_i = \frac{c_i^{eq}}{c_0^{eq}} \quad ; \quad (39)$$

Deste modo, podemos estimar, em função da temperatura, a probabilidade de se encontrar matéria orgânica sem vida; parte-se das equações (39) e (37); donde obtém-se:

$$P_1 = \frac{c_1^{eq}}{c_0^{eq}} = \frac{c_1}{c_0^{eq}} \exp \left[- \frac{\mu_1 - \mu_1^{eq}}{RT} \right] \quad ; \quad (40)$$

No caso de componentes *biológicos* numerados da forma 2; 3; 4...N; pressupõe-se que a probabilidade P_i consiste na probabilidade de se encontrar *simultaneamente* produtos

constituídos de matéria orgânica, com probabilidade P_1 , multiplicada pela probabilidade $P_{i;a}$ de obter a *informação contida nos genes*, que, por sua vez, determina a seqüência dos aminoácidos. Tem-se, então:

$$P_i = P_1 \cdot P_{i;a} \quad (i \geq 2) \quad (41)$$

Os organismos vivos usam da ordem de 20 amino-ácidos diferentes. Cada gene determina a seqüência de cerca de 700 amino-ácidos. Pode-se estimar $P_{i;a}$ a partir da seguinte fórmula:

$$P_{i;a} = 20^{i-700n_g} ; \quad (42)$$

onde n_g é o número de genes.

Usando-se a equação (39) ; reescrevemos da seguinte forma:

$$c_i^{eq} = P_i c_0^{eq} ; \quad (43)$$

que, juntamente com a definição geral de exergia, fornece:

$$E_X = R:T: \sum_{i=0}^{\infty} c_i \log \frac{c_i}{P_i c_0^{eq}} + (c_i - P_i c_0^{eq}) ; \quad (44)$$

que pode ser reescrita como

$$\frac{E_X}{RT} = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \log \frac{c_i}{P_i c_0^{eq}} + \sum_{i=0}^{\infty} (c_i - P_i c_0^{eq}) ;$$

ou, ainda,

$$\frac{E_X}{RT} = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \log P_i + \sum_{i=0}^{\infty} c_i \log \frac{c_i}{c_0^{eq}} + \sum_{i=0}^{\infty} (c_i - P_i c_0^{eq}) ; \quad (45)$$

Introduzindo, a seguir, as seguintes aproximações:

$$\frac{c_i}{c_0^{eq}} \approx 1; \quad c_i - P_i c_0^{eq} \approx 0 ; \quad (46)$$

observamos que, nestas condições, a equação (45) reduz-se para:

$$\begin{aligned} \frac{E_X}{RT} &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i \log P_i + \sum_{i=2}^{\infty} c_i \log P_1 P_{i;a} = \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} c_i \log P_i + \sum_{i=2}^{\infty} c_i \log P_1 + \sum_{i=2}^{\infty} c_i \log P_{i;a} \end{aligned} \quad (47)$$

onde se usou a equação (41) e se descartou a *componente inorgânica* indicada por índice zero.

Os dois primeiros termos desta última expressão podem ser agrupados em um único somatório, donde escrevemos:

$$\frac{E_X}{RT} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \log P_1 + \sum_{i=2}^{\infty} c_i \log P_{i;a} ; \quad (48)$$

Podemos substituir $\log P_1$; fazendo uso da eq. (40); isto é,

$$\log P_1 = \sum_{i=1}^n \frac{c_i}{RT} \ln \frac{1}{P_i} \quad (49)$$

de modo a obter a forma final para a exergia, como segue:

$$\frac{E_x}{RT} = \sum_{i=1}^n \frac{c_i}{RT} \ln \frac{1}{P_i} \quad (50)$$

Esta formulação leva em conta não apenas aspectos termodinâmicos clássicos mencionados anteriormente, mas considera igualmente os aspectos biológicos relevantes, introduzidos através da quantidade $P_{i;a}$.

9. Modelagem de florestas: mais detalhes

É interessante registrar aqui uma versão mais detalhada da modelagem de florestas, elaborada por H. Bossel e publicada em *Ecological Modelling*, 90 (1996): 187-227.

9.1 Introdução e comentários gerais

A mudança das condições ambientais, induzidas por várias formas de poluição de diversas origens, mudanças climáticas, assim como alterações da dinâmica do solo, são fatores experimentalmente bem conhecidos, que contribuem para alterações na dinâmica florestal.

Existem fundamentalmente duas abordagens competitivas para a modelagem da *dinâmica de florestas*:

1) modelos descritivos baseados em dados estatísticos, regressões e modelos de correlação, que nos interessam menos;

2) modelos de característica explanatória, que constituem tentativas de modelizar, o mais fielmente possível, a estrutura real dos sistemas.

Os *modelos de característica explanatória* procuram descrever corretamente os processos principais que determinam a evolução do sistema, usualmente descrevendo as taxas de mudança das variáveis de estado, em termos de equações diferenciais. Em geral, o arcabouço matemático de tais equações, definido pela estrutura do sistema em estudo, é altamente não linear e, devido a este fato, pode gerar uma dinâmica muito complexa. Se neste modelo forem adequadamente incluídos os processos mais relevantes, pode-se esperar uma descrição do sistema, mesmo alterando, dentro de um largo espectro, as condições iniciais; isto deve ocorrer mesmo que os parâmetros ecofisiológicos sejam tratados de uma forma simplificada. Os modelos de dinâmica de florestas devem exibir de que forma mudanças climáticas, processos de gerenciamento florestal e acidificação do solo induzem alterações na futura produção da floresta em termos de madeira, frutos, sementes etc. No caso em que variam as condições ambientais, ou não se dispõe de recursos adequados para realizar as longas e custosas observações de campo, ou ainda, caso seja necessário entender as consequências dinâmicas de diversos processos ecofisiológicos, no desenvolvimento da árvore ou do bosque, em condições ambientais diferentes, apenas os modelos envolvendo proces-

sos têm condições de fornecer uma resposta significativa.

O modelo TREEDYN3 tem características explanatórias. Em particular, difere de outras abordagens, por levar explicitamente em conta a variação diurna e a estação do ano, na fotossíntese assim como na respiração (dependente da temperatura), na fenologia e nos processos que ocorrem no solo. Este modelo é suficientemente geral para cobrir diversos tipos de floresta (árvores de diversas espécies), condições de solo e clima. Além disto, Barth (1994) (Ref. 12.2 -1) desenvolveu um algoritmo particularmente interessante para otimização de parâmetros, caso se disponha de dados a respeito de uma determinada floresta. Um exemplo de aplicação deste modelo tem sido o estudo do desenvolvimento futuro de bosques de acácias (*Acacia auriculaeformis*), que foram trazidas da Austrália e introduzidas no Sul da China, apenas dez anos atrás. Além desta aplicação, o programa também já foi usado para investigar florestas de pinhos na Europa Central e no Noroeste na Europa. Sob condições de gerenciamento florestal, corte e fertilização, estes tipos de modelagem foram desenvolvidos com o objetivo de fornecer um quadro coerente, em que processos ecofisiológicos distintos, das árvores e do solo, possam ser descritos de uma forma integrada, permitindo um controle de gerenciamento florestal adequado.

9.2 Descrição do tipo de modelo

O modelo TREEDYN3 calcula as mudanças dinâmicas (incluindo as mudanças diurnas e sazonais) de 14 variáveis de estado que caracterizam uma árvore típica de um bosque, assim como o solo com o qual a árvore está associada. A lista das variáveis, assim como o símbolo que será adotado para cada uma, é estabelecida, juntamente com as unidades correspondentes, nas duas tabelas abaixo; a primeira refere-se ao *subsistema das árvores*:

Símbolo	Variável	Unidade
H	Altura da árvore	m
D	Diâmetro da árvore	m
Q	Número de árvores	$\#rv(ha)^{-1}$
L	Massa das folhas	$tC(ha)^{-1}$
R	Massa das raízes finas	$tC(ha)^{-1}$
F	Massa dos frutos	$tC(ha)^{-1}$
A	Reservatório de assimilados	$tC(ha)^{-1}$
W	Biomassa da madeira em pé	$tC(ha)^{-1}$
N _W	N na madeira	$tN(ha)^{-1}$

enquanto que a segunda, ao **subsistema solo**:

Símbolo	Variável	Unidade
C_G	C na serrapilheira	$tC (ha)^i^{-1}$
C_S	C em matéria orgânica no solo	$tC (ha)^i^{-1}$
N_G	N na serrapilheira	$tN (ha)^i^{-1}$
N_S	N em matéria orgânica no solo	$tN (ha)^i^{-1}$
N	N disponível para plantas	$tN (ha)^i^{-1}$

Estas variáveis estão acopladas entre si, de maneira que estabelecem um complexo sistema não linear, com uma estrutura que inclui *feedbacks*, cuja dinâmica é sensível a diferentes condições ambientais e de gerenciamento florestal.

São necessários, para os cálculos, os seguintes parâmetros:

- 1) valores iniciais das variáveis de estado;
- 2) parâmetros da fotossíntese;
- 3) respiração, mortalidade e renovação de estoque;
- 4) densidades de carbono e conteúdo de Nitrogênio;
- 5) parâmetros climáticos;
- 6) parâmetros do solo e sua decomposição;
- 7) parâmetros de poluição e de gerenciamento florestal.

Para evitar a introdução de erros numéricos, a acumulação total de carbono e Nitrogênio, C_{total} e N_{total} ; são também calculadas durante o processo de autoconsistência.

9.3 Obtenção das equações diferenciais

Trata-se de um complexo conjunto de equações diferenciais ordinárias, de primeira ordem, acopladas. No modelo em questão, existem 14 variáveis de estado, subdivididas em dois subsistemas:

- I) 9 variáveis de estado descrevem o crescimento das árvores;
- II) 5 variáveis de estado descrevem os processos que ocorrem no solo.

O modelo também inclui uma condição de contorno, envolvendo duas variáveis adicionais, C_{tot} e N_{tot} , que assegura a conservação de C e de N.

A seguir, escreveremos as equações de movimento para cada um dos subsistemas envolvidos.

9.3.1 Subsistema das árvores

Representando por Q , o número de árvores de dada espécie, existentes em determinada área de um bosque, e supondo que não exista a possibilidade de regeneração destas árvores, concluímos que Q é uma função *decrecente* do tempo, isto é:

$$\frac{dQ}{dt} = -q_{mort} Q; \quad q_{mort} > 0; \quad (51)$$

Decorre, da mesma suposição, que a altura H e o diâmetro D , que constituem os dados geométricos característicos destas árvores, devem ser funções ou *crecentes* ou *constantes do tempo*; portanto

$$\frac{dH}{dt} = h_{\text{cres}}; \quad h_{\text{cres}} \geq 0; \quad (52)$$

$$\frac{dD}{dt} = d_{\text{cres}}; \quad d_{\text{cres}} \geq 0; \quad (53)$$

As três equações diferenciais acima, que enfatizam a natureza geométrica das árvores, devem ser complementadas pelas equações diferenciais para a massa das folhas, L , para a massa das raízes finas, R , e, finalmente, para a massa dos frutos, F . A dinâmica correspondente envolve, nos três casos, uma taxa de *crecimento*, uma taxa de *perda* por *queda no solo* e ainda uma taxa de perda por *morte*. Assim, podemos escrever:

$$\frac{dL}{dt} = l_{\text{cres}} - l_{\text{perda}} - l_{\text{mort}}; \quad (54)$$

$$\frac{dR}{dt} = r_{\text{cres}} - r_{\text{perda}} - r_{\text{mort}}; \quad (55)$$

$$\frac{dF}{dt} = f_{\text{cres}} - f_{\text{perda}} - f_{\text{mort}}; \quad (56)$$

onde o sinal do termo identifica perda (-) ou crescimento (+):

A equação diferencial para a dinâmica do assimilado A , também denominado carboidrato, através do qual a fotossíntese fixa o carbono, apresenta cinco contribuições distintas, como segue:

$$\frac{dA}{dt} = a_{\text{prod}} + a_{\text{reloc}} - a_{\text{resp}} - a_{\text{cres}} - a_{\text{mort}}; \quad (57)$$

a equação diferencial acima contempla a possibilidade deste carboidrato aumentar diretamente pela produção fotossintética a_{prod} , assim como uma pequena quantidade por realocação a_{reloc} ; por outro lado, o carboidrato é consumido pela respiração do tecido vivo a_{resp} , assim como pela necessidade de crescimento a_{cres} . A presença do termo a_{mort} acusa que algum carboidrato é perdido pela morte da árvore.

Quanto à biomassa de madeira em árvores, W ; representa-se o ganho por w_{incre} , enquanto as perdas por madeira morta de árvores vivas, assim como por mortalidade das árvores, estão incluídas em w_{perda} ; como segue:

$$\frac{dW}{dt} = w_{\text{incre}} - w_{\text{perda}}; \quad (58)$$

Para o cálculo da quantidade flutuante de nitrogênio na madeira N_W ; é necessário separar partes que respiram (como o alburno) das que não respiram (como o cerne da madeira). Por definição, alburno é a parte periférica e mais nova da madeira do tronco da árvore; possui cor clara e é onde as células vivas realizam a condução de água de baixo para cima.

Representando por b e ρ_0 , respectivamente, a taxa de respiração da madeira e a taxa de incremento introduzida pelo conteúdo de alburno, identifica-se, para um ganho em madeira w_{incre} , uma contribuição através de um termo $w_{\text{incre}} \cdot b \cdot \rho_0$; na equação para a evolução temporal de N_W .

Por outro lado, visto que o cerne da madeira não respira, a taxa de incremento ρ_i introduzida por este último vem multiplicada por um fator $(1 - b) \epsilon W_{\text{incre}}$.

Assim, para um ganho em madeira W_{incre} , tem-se uma variação total dada por $W_{\text{incre}} [b \rho_0 + (1 - b) \rho_i]$.

Além disso, representando por ρ_W a *perda média de nitrogênio*, a contribuição para a taxa de variação de N_W possui a forma $\rho_W \epsilon W_{\text{perda}}$.

Portanto a quantidade média flutuante de nitrogênio satisfaz a equação diferencial:

$$\frac{dN_W}{dt} = W_{\text{incre}} [b \rho_0 + (1 - b) \rho_i] - \rho_W W_{\text{perda}} \quad (59)$$

9.3.2 Subsistema solo

Para o subsistema solo, serão estabelecidas as equações diferenciais para as cinco variáveis discriminadas na segunda das tabelas acima, a saber: C_G , C_S , N_G , N_S e N ; o índice G é usado para material localizado na serrapilheira, enquanto que o índice S indica material orgânico no solo (humus). Outros dois índices serão utilizados, para as diversas taxas envolvidas nas equações diferenciais que serão estabelecidas a seguir, de acordo com os diversos caminhos possíveis para o fluxo de carbono e de nitrogênio, entre quatro compartimentos: *E*, para ambiente atmosférico e *N*, para indicar nitrogênio disponível para as plantas.

O carbono C_G , localizado nos *refugos da floresta* (serrapilheira ou manta), aumenta com a taxa de queda destes materiais c_G , e diminui com a *decomposição* descrita por c_{GE} e pela *transformação em humus* c_{GS} , de acordo com:

$$\frac{dC_G}{dt} = c_G - c_{GE} - c_{GS} \quad (60)$$

Por outro lado, o carbono localizado em matéria orgânica (humus) aumenta com a *taxa de humificação* c_{GS} e diminui com a *decomposição do humus* c_{SE} :

$$\frac{dC_S}{dt} = c_{GS} - c_{SE} \quad (61)$$

Quanto ao nitrogênio que se encontra na serrapilheira, N_G , este aumenta com a taxa de produção de serrapilheira n_G e diminui com a transferência de nitrogênio para a humificação n_{GS} e com a mineralização da serrapilheira, n_{GN} ; portanto, sua evolução temporal obedece a equação diferencial:

$$\frac{dN_G}{dt} = n_G - n_{GS} - n_{GN} \quad (62)$$

Cabe agora considerar o nitrogênio contido na matéria orgânica do solo N_S ; este aumenta com a taxa de humificação n_{GS} e deve diminuir com a taxa de mineralização do humus n_{GN} ; portanto:

$$\frac{dN_S}{dt} = n_{GS} - n_{GN} \quad (63)$$

Finalmente, resta considerar o nitrogênio disponível no solo para plantas, N ; esta quantidade aumenta de acordo com as taxas de precipitação, n_{prec} , de fixação de nitrogênio, n_{fix} , de mineralização da serrapilheira, n_{GN} e de mineralização do humus, n_{SN} ; por outro lado, o Nitrogênio disponível para plantas no solo diminui com o processo de lixívia, através

da taxa n_{lixiv} e com a taxa de absorção pelas plantas, n_{plant} . Portanto, sua evolução segue:

$$\frac{dN}{dt} = n_{\text{preci}} + n_{\text{fix}} + n_{\text{SN}} + n_{\text{GN}} - n_{\text{lixiv}} - n_{\text{plant}} \quad (64)$$

Uma vez reconhecidas as diversas contribuições (positivas e negativas) para as taxas de variação das 14 (quatorze) variáveis de estado enumeradas na secção 7.3.2, procede-se ao estabelecimento de relações envolvendo estas contribuições. Através destas relações, ficará evidente que as equações diferenciais acima são acopladas, fato que não está aparente até o momento.

9.3.3 Geometria das árvores e do bosque

O volume individual dos troncos acima do solo é calculado em termos do diâmetro D e da altura H , incluindo-se um *fator de forma* \hat{A} ; através de:

$$V = \frac{1}{4} \hat{A} \frac{D^2}{2} H = \frac{1}{4} \hat{A} D^2 H \quad (65)$$

Um tronco isolado possui uma massa de carbono dada pela *densidade específica* ρ multiplicada pelo volume dado por eq. (65), como segue:

$$G = \rho V = \rho \frac{1}{4} \hat{A} D^2 H \quad (66)$$

Para definir uma notação adequada, introduz-se a quantidade de madeira por árvore, incluindo a madeira nos ramos e raízes. Esta quantidade é definida por

$$\frac{W}{Q}$$

ou seja, massa de madeira por hectare por árvore.

Vamos assumir, com Hari e colaboradores, a existência de uma dada *lei de escala*. Consideremos o equilíbrio funcional entre a massa das raízes finas e a massa das folhas definida pela razão ρ_{RL} ; isto implica na lei de escala:

$$R_g = \rho_{RL} L \quad (67)$$

Esta relação sendo válida, constitui uma regra para alocar o carboidrato. Procura-se estabelecer uma relação análoga para os frutos:

$$F_g = \rho_{FL} L \quad (68)$$

Tal relação indica, dado um excesso suficiente de nitrogênio e de carboidrato, qual a quantidade de frutos que será produzida. A produção de frutos depende do valor do excesso.

A biomassa do tronco W_S calcula-se a partir da biomassa total W , da biomassa dos galhos ramificados W_B e da biomassa localizada abaixo do nível do solo W_U , através da relação:

$$W_S = W - W_B - W_U \quad (69)$$

Propõe-se agora uma fórmula para a biomassa dos galhos ramificados, acima do solo;

assume-se que decresça exponencialmente com o diâmetro da árvore, i.é:

$$W_B = \alpha_B + (1 - \alpha_B) \exp\left(-i \frac{10D}{D_{\max}}\right) \quad (70)$$

onde α_B é a fração final da biomassa dos galhos em relação a W ; note-se que para

$$\frac{10D}{D_{\max}} = 3; \text{ a eq. (70) corresponde aproximadamente } W_B = \alpha_B \quad (70)$$

Por outro lado, a biomassa *abaixo do nível do solo* é escrita como:

$$W_U = \alpha_U \quad (71)$$

Estas duas expressões são usadas apenas em eq.(69) para estimar a biomassa do tronco. Verifica-se que a dinâmica do bosque não é afetada por estas hipóteses.

Resta agora calcular a *respiração* e o *conteúdo de nitrogênio* no tronco. Para isto, é necessário distinguir entre a madeira que respira (ou seja o alburno que se encontra na parte mais externa do tronco) e a parte interna que não respira (esta última com pouco conteúdo de nitrogênio). Uma forma de calcular aproximadamente a razão do alburno para o cerne da madeira, é assumir que *toda a madeira se encontra em um cone* com diâmetro da base D , altura H_c e com volume:

$$V_c = \frac{1}{12} D^2 H_c \quad (72)$$

Para conter toda a madeira por árvore, a altura do cone é dada por:

$$\frac{W}{Q} = \frac{1}{12} D^2 H_c = \text{massa total por árvore} \quad (72)$$

donde obtém-se a altura:

$$H_c = \frac{12}{D^2} \frac{W}{Q} \quad (73)$$

Faz-se a hipótese de que o alburno se concentra numa “camada” única deste cone com espessura μ . A parte do cerne que não respira é também um cone; e sua altura é dada por:

$$H_i = (D - 2\mu) \frac{H_c}{D} \quad (74)$$

Portanto, o volume da parte mais externa é dado por:

$$V_0 = \frac{1}{12} (D - 2\mu)^2 H_i \quad (75)$$

Desta forma, podemos recuperar o *parâmetro* b envolvido em eq.(59), que dava uma medida da razão de respiração:

$$b = \frac{V_0}{V_c} = \left(\frac{D - 2\mu}{D}\right)^2 \quad (76)$$

Trata-se agora de discutir as *dimensões da copa* das árvores e estabelecer uma conexão com o diâmetro da base D . Considerando que exista uma razão α_c , entre o diâmetro da copa e o diâmetro do tronco, isto é $D_{\text{coroa}} = \alpha_c D$, a projeção da coroa se escreve:

$$S = \frac{1}{4} (\alpha_c D)^2 \quad (77)$$

A vantagem desta lei de homotetia é que, levando-se em conta a maturidade da árvore, tem-se $D = D_{\max}$ e, portanto, obtém-se, para a *máxima projeção da copa*:

$$S_{\max} = \frac{1}{4} (c D_{\max})^2 \quad (78)$$

Note-se que o diâmetro D_{\max} serve apenas para limitar o tamanho máximo das copas. Deve-se notar também que o bosque pode ou não estar completamente coberto pelas copas. Uma questão importante é saber se as coroas interferem. A quantidade QS fornece uma medida da cobertura produzida pelo número de árvores com área de copa S . Uma cobertura média por bosque pode ser definida introduzindo-se uma divisão por $10000 \text{ m}^2/\text{ha}$, obtendo-se:

$$s = \frac{QS}{10000} \quad (79)$$

A quantidade s fornece uma *estimativa* da superposição da sombra das copas; assim, se $s \geq 1$, existe superposição da sombra e, por oposição, se $s < 1$; as coroas não interferem.

Introduz-se ainda outro índice relativo às folhas, tal seja o índice da área das folhas, α , definido em termos da massa por folha L , da cobertura média S e da massa específica do carbono ρ_L ; então, o produto $\rho_L S$ fornece a massa de carbono que seria obtida, caso a projeção média, S ; desse a área das folhas. Tomando-se $100L$ como uma escala de massa foliar, define-se α da seguinte maneira:

$$\alpha = \frac{100L}{\rho_L S} \quad (80)$$

A escala α fornece a razão da *massa de 100 folhas* comparada com a *massa* que estaria associada a uma área média projetada das folhas das copas. Resta agora introduzir o *limite máximo de produção*, \tilde{A} ; associado à atenuação pela copa, o que é fornecido por α_{\max} ; assumindo-se atenuação exponencial:

$$\exp[j \cdot \alpha_{\max}] = \tilde{A} \quad (81)$$

Admitindo-se que \tilde{A} possa ser medido, por exemplo, via espectroscopia foto-acústica, então o *máximo índice foliar* é dado por:

$$\alpha_{\max} = j \frac{\log \tilde{A}}{\alpha} \quad (82)$$

9.3.4 Efeitos da temperatura e funções da temperatura

A variação anual da temperatura está associada à variação da radiação solar com as estações do ano. Para isto, é conveniente definir um *tempo solar* t_s e um *tempo do calendário em dias*, t_d ; estabelecendo a seguinte relação:

$$t_s = \frac{t_d + 10}{365} = t + \frac{10}{365} \quad ; \quad (83)$$

onde t é o *tempo regular*. Por outro lado, pode-se representar a *temperatura* T com relação a *média* T_{med} ; em termos de uma função sinusoidal, desde que se defina T_{amp} como sendo a *diferença* entre a temperatura média do mês mais frio e a do mais quente. Tem-se:

$$T = T_{\text{med}} + \frac{T_{\text{amp}}}{2} \sin \left[2\pi \left(t_s - \frac{1}{12} \right) \right] \quad (84)$$

No caso da *temperatura do solo*, T_s espera-se uma variação anual semelhante, entretanto com uma amplitude reduzida da variação de temperatura, por um *fator de amortecimento* μ , isto é:

$$T_s = T_{med} + \mu \cdot (T - T_{med}) \quad (85)$$

Algumas funções da temperatura

A *respiração* das árvores e processos ocorrendo no solo dependem da temperatura. Nota-se uma atividade reduzida em temperaturas mais baixas. A dependência com a temperatura será representada por uma função quadrática:

$$k_{resp} = \frac{\mu}{T_n - T_0} \sqrt{\frac{T - T_0}{T_n - T_0}} \quad \text{se } T_0 \leq T \leq T_{lim} \quad (86)$$

$$k_{resp} = 0 \quad \text{se } T < T_0 \text{ ou } T > T_{lim} \quad (87)$$

Nesta equação, T_0 e T_{lim} são as temperaturas mínima e máxima, em que toda respiração deixa de ocorrer. Note-se que para $T = T_n$, tem-se $k_{resp} = 1$, que corresponde à atividade normal.

Para processos ocorrendo a nível do solo, tais sejam decomposição, mineralização, adotamos uma formulação semelhante, envolvendo, neste caso, as temperaturas T_{s0} (ausência de atividade) e T_{sn} (atividade normal). Então, as equações se escrevem:

$$k_{Ts} = \frac{\mu}{T_{sn} - T_{s0}} \sqrt{\frac{T - T_{s0}}{T_{sn} - T_{s0}}} \quad \text{se } T_{s0} \leq T \leq T_{lim} \quad (88)$$

$$k_{Ts} = 0 \quad \text{se } T < T_{s0} \text{ ou } T > T_{lim} \quad (89)$$

O efeito da temperatura na fotossíntese é semelhante em temperaturas mais baixas. A fotossíntese atinge um ótimo desempenho em dada temperatura T_{opt} e tende para zero com o aumento da temperatura. Um modelo adequado para este comportamento se escreve:

$$k_{Tp} = 2 \frac{\mu}{T_{opt} - T_{p0}} \sqrt{\frac{T - T_{p0}}{T_{opt} - T_{p0}}} \quad \text{se } T_{p0} \leq T \leq \frac{T_{opt} + T_{p0}}{2} \quad (90)$$

$$k_{Tp} = 1 - 2 \frac{\mu}{T_{opt} - T_{p0}} \sqrt{\frac{T - T_{opt}}{T_{opt} - T_{p0}}} \quad \text{se } \frac{T_{opt} + T_{p0}}{2} < T \text{ e } k_{Tp} > 0 \quad (91)$$

$$k_{Tp} = 0 \quad \text{se } T < T_{p0} \text{ ou } T > T_{crit} \quad (92)$$

onde T_{crit} é dado por:

$$T_{crit} = T_{opt} + \frac{1}{2} (T_{opt} - T_{p0}) \quad (93)$$

9.3.5 Introdução à radiação solar

A radiação *fotoativa* (PAR) para o *céu claro*, definida por I_0 é dada por uma *fração* da radiação solar total. Esta fração $\rho_{PAR} = 0,47$ reduz a constante solar, que vale 1360 W/m^2 . A intensidade fotoativa deve levar em conta a *altura solar* definida através de \sin^{-1} ; a absorção atmosférica depende da razão da absorção atmosférica $\cdot atm$ pela altura solar, através

da fórmula:

$$I_0 = 1360 \cdot P_{AR} \sin^{-1} \exp \left[-\mu \frac{1}{\sin^{-1}} \right] \quad (94)$$

A altura solar pode ser calculada em termos da *latitude* ϕ , da *declinação* δ e da *hora do dia* t_h ; através da fórmula:

$$\sin^{-1} = \sin \phi \sin \delta + \cos \phi \cos \delta \cos \frac{2\pi}{24} (t_h + 12) \quad (95)$$

A *declinação* δ é dada em termos do *dia do ano*, pela fórmula:

$$\delta = \pm 23.4 \frac{\pi}{180} \cos \frac{2\pi}{365} (t_d + 10) = \pm 23.4 \frac{\pi}{180} \cos [2\pi t_s] \quad (96)$$

Nos modelos mais detalhados de floresta, a fotossíntese das copas deve levar em conta a mistura de dias de céu claro e dias com muitas nuvens. A atividade fotossintética, neste último caso, é devida à radiação I_1 ; enquanto que em dias de céu claro a radiação fotoativa é dada por I_0 . A introdução de uma mistura é relevante, na medida em que a curva fotossintética, sendo não linear, uma radiação média pode introduzir erros visto que $I_1 = 0.2I_0$, conforme determinado experimentalmente.

A fração temporal de dias nublados, f ; pode ser determinada partindo-se de observações meteorológicas que fornecem a *radiação anual* recebida J_a , em $\frac{kWh}{hm^2}$: Tem-se:

$$J_a = \frac{8.76}{PAR_0} \int_0^Z [(1-f) I_0(t) + f I_1(t)] dt \quad (97)$$

Desta equação, uma vez conhecida J_a via meteorologia, pode-se deduzir o valor da *fração* f de dias nublados que venha reproduzir o valor observado de J_a .

Outro fator de interesse é a dependência sazonal da duração do dia, de forma a se poder calcular corretamente a incidência de radiação. Esta dependência temporal é tomada como sinusoidal e requer a introdução de diversos parâmetros. A hora do nascer do sol, no solstício de verão, é dada por:

$$h_{ss} = \frac{12}{\pi} \arctan \left[\frac{\sin \phi \sin \delta_{ss}}{\cos \phi \cos \delta_{ss}} \right] \quad (98)$$

onde

$$m = \frac{\sin \phi \sin \delta_{ss}}{\cos \phi \cos \delta_{ss}} \quad (99)$$

Usando-se o momento do nascer do sol no solstício de verão assim como a simetria em torno do equinócio, o máximo e mínimo da duração do dia no solstício de verão e de inverno, h_{max} e h_{min} ; assim como a amplitude da duração do dia h_{amp} podem ser calculadas como segue:

$$h_{max} = 24 - 2h_{ss} \quad (100)$$

$$h_{min} = 2h_{ss} \quad (101)$$

$$h_{amp} = 24 - 4h_{ss} \quad (102)$$

Em termos do tempo solar t_s ; a *variação sazonal* da duração do dia se escreve:

$$h = 12 + \frac{h_{amp}}{2} \sin \frac{2\pi}{3} t_s \quad (103)$$

Seguindo-se um procedimento análogo, pode-se calcular a quantidade de radiação fotoativa nestas épocas do ano, dias de solstício de verão e de inverno, respectivamente J_{max} e J_{min} .

As equações abaixo devem ser calculadas para dias claros e nebulosos, isto é, $I^a = I_0$ e $I^a = I_1$

$$J_{max} = \int_{Z^0}^{Z_{24}} I^a(t_{h:SS}) dt_h \quad (104)$$

$$J_{min} = \int_0^{Z_{24}^0} I^a(t_{h:WS}) dt_h \quad (105)$$

Com estes valores, podemos calcular a média e a amplitude:

$$J_{amp} = J_{max} - J_{min} \quad (106)$$

$$J_{med} = J_{min} + \frac{J_{amp}}{2} \quad (107)$$

A variação sazonal da incidência fotoativa pode ser escrita:

$$J(t_s) = J_{med} + \frac{J_{amp}}{2} \sin \left(2\pi t_s \cdot \frac{1}{2} \right) \quad (108)$$

9.3.6 Introdução da fotossíntese no modelo

O modelo 3DYN3 calcula, diariamente, a fotossíntese associada à copa da árvore, partindo da radiação momentaneamente recebida por uma camada de folhas. Esta quantidade é então integrada sobre todas as camadas de folhas e também integrada sobre o período de luz do dia. Duas abordagens são possíveis neste ponto: integração numérica, ou então usando-se algumas funções específicas que permitam integração analítica. No 3DYN3, usam-se funções específicas para a atenuação da luz pela copa, sensibilidade das folhas à luz e a variação diária da radiação. Este procedimento permite ampliar consideravelmente a rapidez dos cálculos.

Introduzindo-se I^a para a intensidade da luz (vide detalhes acima), e assumindo uma forma exponencial para a atenuação pela copa, com coeficiente de absorção \cdot , e ainda considerando-se a atenuação pela camada de folhas I , podemos, com estas hipóteses, escrever que a radiação fotoativa nesta camada é:

$$I_1 = I^a \exp [i \cdot (I - 1)] \quad (109)$$

Assume-se a seguinte forma para a curva de resposta à radiação, forma esta válida para todas as folhas:

$$p_l = \frac{\theta \cdot I_1}{1 + \frac{\theta \cdot I_1}{p_{max}}} ; \quad (110)$$

nesta expressão, θ é a inclinação inicial da curva de resposta à incidência de luz. Tomando-se o limite $I \rightarrow 1$, verifica-se o significado de p_{max} . Resta efetuar uma integração sobre todas as camadas de folhas n . Isto fornece a taxa instantânea de fotossíntese da copa, definida como p_c , em função dos parâmetros característicos da curva de resposta à luz. Consideremos os parâmetros $(\theta; p_{max})$, típicos da espécie de árvore, da atenuação da luz

pela copa (\cdot), pelo índice de área das folhas α e pela radiação momentânea acima da copa I^a . O resultado final desta operação é:

$$p_c = \int_0^z p_i dl = \frac{p_{max}}{\alpha} \log \frac{1 + \frac{I^a}{p_{max}}}{1 + \frac{I^a}{p_{max}} \exp(j \cdot \alpha)} \quad (111)$$

Este resultado para p_c corresponde a uma série de condições favoráveis; tal resultado deve, portanto, ser modificado de modo a incluir as contribuições ignoradas. Inicialmente, relembremos o efeito da temperatura na fotossíntese k_{Tp} , a poluição p_p , a nebulosidade β e o status do nitrogênio, como será discutido adiante. Finalmente, existe uma questão de unidades; a taxa de produção em $mg_{CO_2} dm^{-2} h^{-1}$ deverá ser convertida em $tC (ha)^{-1} ano^{-1}$. Para isto, deve ser introduzido um fator 2:389, de conversão.

A produção média de carboidrato pode então ser escrita, como segue:

$$a_{prod} = 2:389 k_{Tp} k_N^2 \left[(1 - \beta) p_{c0} + \beta p_{cl} \right] \quad (112)$$

Nesta expressão, p_{c0} corresponde à fotossíntese de dia claro: $I^a = I_0$; p_{cl} , por outro lado, corresponde a céu de nuvens, com $I^a = I_1$. O termo k_N^2 introduz o efeito progressivamente limitante da falta de nitrogênio.

9.3.7 Construção das equações diferenciais envolvendo termos simplificados

Trata-se de incluir, nas equações diferenciais obtidas acima, os mecanismos físico-fisiológicos necessários. Assim, temos os seguintes casos:

1) A humificação transforma uma parte do carbono da serrapilheira C_G em carbono no humus, com a taxa:

$$c_{GS} = \tilde{A} \frac{1}{2}_{dec} k_{Ts} C_G \quad (113)$$

onde \tilde{A} é a taxa de humificação e $\frac{1}{2}_{dec}$ a taxa normal de decomposição, a qual é modificada pelo efeito da temperatura do solo k_{Ts} dada pelas equações (88) e (89).

2) Por outro lado, na decomposição da serrapilheira, a maior parte do carbono escapa para a atmosfera sob forma de CO_2 ; de acordo com a taxa:

$$c_{GE} = (1 - \tilde{A}) \frac{1}{2}_{dec} k_{Ts} C_G \quad (114)$$

com a mesma notação acima.

Substituindo as eqs.(113) e (114) em eq.(60), obtém-se:

$$\frac{dC_G}{dt} = c_{GE} - c_{GS} = \quad (115)$$

$$= C_G \left[\frac{1}{2}_{dec} k_{Ts} - \tilde{A} \right] \quad (116)$$

Nesta equação, resta ainda definir a quantidade de carbono na serrapilheira, de maneira a completar a equação diferencial, o que será feito mais adiante.

3) A quantidade de humus "presente no compartimento de matéria orgânica" eventualmente pode decompor-se, enviando carbono para a atmosfera sob forma de CO_2 ; isto se

faz com a taxa:

$$c_{SE} = \frac{1}{2} k_{TS} C_S : \quad (117)$$

Utiliza-se agora a equação (113), juntamente com a equação (61) ; donde obtém-se:

$$\frac{dC_S}{dt} = c_{GS} - c_{SE} = \quad (118)$$

$$= \frac{1}{2} k_{dec} k_{TS} C_G - \frac{1}{2} k_{TS} C_S : \quad (119)$$

4) A taxa de transferência de nitrogênio, associada à humificação, depende da razão do Nitrogênio para o carbono; tem-se, então:

$$n_{GS} = c_{GS} \frac{\mu N_s}{C_s} : \quad (120)$$

5) A mineralização da serrapulleira contribui para aumentar a capacidade de fornecimento de nitrogênio para as plantas, com a taxa:

$$n_{GN} = \frac{1}{2} k_{dec} k_{TS} N_G - n_{GS} \quad (121)$$

Combinando-se as eqs.(120) e (121) com (62), obtém-se:

$$\frac{dN_G}{dt} = n_G - n_{GS} - n_{GN} = \quad (122)$$

$$= n_G - \frac{1}{2} k_{dec} k_{TS} N_G \quad (123)$$

Resta agora combinar as eqs.(121) e (120) com (63) ; para se obter:

$$\frac{dN_S}{dt} = n_{GS} - n_{GN} = c_{GS} \frac{\mu N_s}{C_s} - \frac{1}{2} k_{dec} k_{TS} N_G + n_{GS} \quad (124)$$

ou, finalmente:

$$\frac{dN_S}{dt} = 2c_{GS} \frac{\mu N_s}{C_s} - \frac{1}{2} k_{dec} k_{TS} N_G \quad (125)$$

Incorporando, ainda a *mineralização do humus*, através da taxa:

$$n_{SN} = \frac{1}{2} k_{TS} N_S : \quad (126)$$

e também a taxa com a qual o nitrogênio é perdido do reservatório disponível para as plantas, através de lixiviação:

$$n_{lixiv} = \frac{1}{2} l_{lixiv} N : \quad (127)$$

6) Os processos de *fixação de nitrogênio* associados às *bactérias* habitantes do solo ou então as *bactérias associadas aos legumes* etc., que contribuem também para o reservatório de nitrogênio para uso das plantas, e assumindo que esta taxa seja proporcional à projeção média da copa das árvores S , isto é:

$$n_{fix} = n_{fix\ max} k_{TS} \frac{\mu S}{\alpha_{\max}} \quad (128)$$

e, combinando-se com a equação (64), obtém-se:

$$\frac{dN}{dt} = n_{\text{preci}} + n_{\text{fix}} + n_{\text{SN}} + n_{\text{GN}} - n_{\text{lixiv}} - n_{\text{plant}} ; \quad (129)$$

onde

$$\begin{aligned} n_{\text{fix}} &= n_{\text{fix,max}} k_{T_s} \frac{\mu}{\alpha_{\text{max}}} S; & n_{\text{SN}} &= \frac{1}{2} \mu_{\text{min}} k_{T_s} N_S \\ n_{\text{GN}} &= \frac{1}{2} \mu_{\text{dec}} k_{T_s} N_{G_i} - n_{\text{GS}}; & n_{\text{lixiv}} &= \frac{1}{2} \mu_{\text{lixiv}} N \end{aligned} \quad (130)$$

Aproveitando a discussão sobre a fotossíntese, podemos esclarecer melhor o conteúdo da equação diferencial (57); para isto vamos introduzir a forma explícita de alguns termos.

No que diz respeito à respiração, constata-se o consumo de fotossintato pelas folhas, pela madeira, pelos frutos e pelas raízes finas. Cada uma destas possui a sua taxa de respiração específica: $\frac{1}{4}L$, $\frac{1}{4}W$, $\frac{1}{4}F$ e $\frac{1}{4}R$. Estas taxas são corrigidas pelos efeitos da temperatura através das correntes de ar k_{T_r} ; ou então pela temperatura do solo k_{T_s} , conforme o caso. Considerando-se que a respiração das folhas está associada à produção total da fotossíntese, resta apenas descontar a respiração durante a noite, através da correção $(1 - \frac{h}{24})$. Outra correção provém da respiração da madeira; sabemos que o termo bW toma em conta a fração b da madeira que respira. Por outro lado, os frutos possuem um período de respiração ζ_F . Em conclusão, a perda de fotossintato por respiração se escreve:

$$a_{\text{resp}} = k_{T_r} \left(\frac{1}{4}L - \left(1 - \frac{h}{24}\right) \left(\frac{1}{4}L + \frac{1}{4}W bW + \frac{1}{4}F \zeta_F \right) + k_{T_s} \frac{1}{4}R \right) \quad (131)$$

e esta contribuição é incluída em eq.(57).

Outra contribuição, associada ao fotossintato, consiste no crescimento das diversas partes da árvore, e isto é dado pela taxa de crescimento de cada uma delas, dividido pela eficiência de crescimento ϵ . Tem-se então:

$$a_{\text{cresc}} = (l_{\text{cresc}} + r_{\text{cresc}} + f_{\text{cresc}} + w_{\text{incre}}) \epsilon \quad (132)$$

A absorção total de nitrogênio é a soma das diferentes demandas para o crescimento das componentes da árvore, diminuído da relocação da taxa de nitrogênio. Encontra-se a taxa de nitrogênio, para cada componente, multiplicando-se a taxa de carbono pelo conteúdo específico de nitrogênio de cada componente:

$$\begin{aligned} n_{\text{up}} &= \epsilon_L l_{\text{cresc}} + \epsilon_R r_{\text{cresc}} + \epsilon_F f_{\text{cresc}} \\ &+ w_{\text{incre}} [b \epsilon_0 + (1 - b) \epsilon_i] - n_{\text{reloc}} \end{aligned} \quad (133)$$

As árvores relocalam alguma parte do nitrogênio ou do assimilato em folhas, raízes finas e outros tecidos vivos antes do corte. No caso de folhas e raízes finas, tem-se:

$$n_{\text{reloc}} = (\epsilon_L - \epsilon_{\text{Lvelha}}) l_{\text{perda}} + \epsilon_R r_{\text{perda}} \quad (134)$$

Para o caso do assimilato temos (note a diferença entre "N e "A):

$$a_{reloc} = "A (l_{perd} + r_{perd}): \quad (135)$$

Convém relembrar a eq.(112); que descreve o efeito da fotossíntese:

$$a_{prod} = 2:389k_{Tp}k_N^2 i_1 i_3 p_s [(1 i_1) p_{c0} + ! p_{c1}]: \quad (136)$$

9.3.8 Comentários sobre a mortalidade

A taxa de mortalidade normal das árvores é usualmente baixa; assumimos não haver cobertura pelas copas, a qual introduz uma competição pela luz. Temos, portanto,

$$^1 = ^1_{normal} \quad S < 1 \quad (137)$$

Se o espaço disponível no bosque não permite o crescimento completo das copas, assume-se que a mortalidade aumenta, incluindo-se uma mortalidade pela disputa de luz, definida por $^1_{copas}$; levando à seguinte expressão:

$$^1 = ^1_{normal} + ^1_{copas} \quad S > 1 \quad (138)$$

Estes comentários sobre a mortalidade possuem as seguintes implicações:

a) O número de árvores decresce com a taxa:

$$q_{mortas} = ^1 Q \quad (139)$$

b) A biomassa é perdida em todos os compartimentos de carbono das árvores: folhas L, raízes finas R, assimilato A, frutos F; com as seguintes taxas:

$$l_{mortas} = ^1 L \quad (140)$$

$$r_{mortas} = ^1 R \quad (141)$$

$$a_{morta} = ^1 A \quad (142)$$

$$f_{mortos} = ^1 F \quad (143)$$

9.3.9 Renovação das folhas e das raízes

Deve-se observar que as perdas das folhas e das raízes finas, assim como a renovação das folhas e das raízes, são funções das condições de temperatura.

Caso a temperatura do ar nunca fique abaixo da temperatura crítica, T_{veg} , na qual a vegetação cessa de evoluir, as condições são denominadas *tropicais*. Nenhuma distinção, quanto às estações, é introduzida para as folhas e raízes finas, no que diz respeito às perdas e necessidades. Tem-se as *condições tropicais*, definidas por:

$$T_{media} + \frac{T_{amp}}{2} > T_{veg} \quad (144)$$

As perdas em folhas e raízes finas dependem das *taxas de renovação* $\frac{1}{2}_L$ (folhas) e $\frac{1}{2}_R$ (raízes), respectivamente, e tais taxas de renovação dependem criticamente dos efeitos de *poluição*, crescendo com 3_L e 3_R de acordo com:

$$l_{perda} = \frac{1}{2}_L (1 + ^3_L) L \quad (145)$$

$$r_{\text{perda}} = \frac{1}{2} R (1 + \alpha_R) \quad (146)$$

Por outro lado, as necessidades para a renovação das folhas e das raízes finas dependem das taxas de perda l_{perda} e r_{perda} , da taxa de fluxo $\frac{1}{2} f_{\text{fluxo}}$ e da discrepância entre a massa prevista de folhas e raízes. Tem-se:

$$l_{\text{necess}} = l_{\text{perda}} + (L_{\text{lim}} - L) \frac{1}{2} f_{\text{fluxo}} \quad (147)$$

$$r_{\text{necess}} = r_{\text{perda}} + (\alpha_R L_{\text{lim}} - R) \frac{1}{2} f_{\text{fluxo}} \quad (148)$$

Uma estimativa para as folhas é:

$$L_{\text{lim}} = \frac{S_{\text{max}}^{\alpha} L}{100} \quad (149)$$

Se a temperatura do ar fica abaixo da temperatura mínima para vegetação T_{veg} , a situação corresponde à classificação de sazonal. Nestas condições deve-se estabelecer uma distinção entre a estação fria e a estação vegetativa. Conclui-se que perdas distintas de folhas e de raízes finas devem ocorrer nestas épocas, assim como são distintas as necessidades que se aplicam nos dois casos. As *condições sazonais* estão definidas pela desigualdade:

$$T_{\text{med}} - \frac{T_{\text{amp}}}{2} < T_{\text{veg}} \quad (150)$$

Durante a *estação fria* (isto é, para $T < T_{\text{veg}}$) a perda de folhas é calculada pela taxa de queda $\frac{1}{2} q_{\text{queda}}$, sendo que a taxa de perdas aumenta com a poluição α_L e a discrepância entre a massa das folhas existente L e a massa de folhas que devem perdurar após a queda $(1 - \frac{1}{2} \alpha_L) L_{\text{velhas}}$ para uma dada renovação. Para uma dada taxa de perda, L_{velhas} é o máximo de massa de folhas durante a estação vegetativa; portanto a perda se escreve:

$$l_{\text{perda}} = \frac{1}{2} q_{\text{queda}} (1 + \alpha_L) [L - (1 - \frac{1}{2} \alpha_L) L_{\text{velhas}}] \quad (151)$$

Durante este período a demanda pelas folhas é zero:

$$l_{\text{dem}} = 0 \quad (152)$$

Durante o período vegetativo, $T \geq T_{\text{veg}}$; a perda de folhas é supostamente nula e a demanda das folhas é dada por:

$$l_{\text{dem}} = \frac{1}{2} f_{\text{fluxo}} (L_{\text{lim}} - L) \quad (153)$$

Com as perdas de raízes finas não é feita distinção sazonal, a qual é proporcional à taxa de renovação $\frac{1}{2} R$; assim como a renovação deve *aumentar* devido à *poluição* α_R :

$$r_{\text{perda}} = \frac{1}{2} R (1 + \alpha_R) \quad (154)$$

As exigências das raízes ocorrem apenas durante a estação vegetativa, e isto quando a temperatura T_s do solo excede o mínimo para crescimento das raízes T_r , ($T_s \geq T_r$). Esta carência é definida pela taxa de perda e pela discrepância com as perspectivas de crescimento:

$$r_{\text{dem}} = r_{\text{perda}} + \frac{1}{2} f_{\text{fluxo}} (\alpha_R L_{\text{lim}} - R) \quad (155)$$

Durante a estação fria ($T < T_r$) a exigência de crescimento é nula:

$$\Gamma_{dem} = 0: \quad (156)$$

9.3.10 Disponibilidade de assimilados e de nitrogênio

Um dos pontos principais deste programa é a alocação de assimilado e de nitrogênio para os processos de crescimento da árvore. O programa estabelece uma estratégia de prioridades:

- 1) Inicialmente, são satisfeitas as necessidades de *respiração* de todas as partes.
- 2) Em seguida, as necessidades de renovação das folhas e raízes finas são satisfeitas, na proporção da disponibilidade de assimilados e/ou nitrogênio.
- 3) Os assimilados restantes são usados para o crescimento dos frutos, se o nitrogênio disponível assim o permitir.
- 4) Caso ainda exista uma sobra de assimilados, esta é usada para incrementos até o limite do nitrogênio disponível.

Este procedimento de prioridades de alocação exige a consideração de *fatores de disponibilidade*. Estes fatores determinam quanto crescimento é permitido dentro das circunstâncias presentes.

O fator de disponibilidade de assimilado é definido por:

$$k_A = \frac{(A_i - A_R) \frac{1}{2} a_{prod} + a_{resp}}{I_{dem} + \Gamma_{dem}} \quad (157)$$

Este fator compara a taxa com que o assimilado é disponível (*numerador*) com a taxa necessária para as folhas e as raízes finas (*denominador*). O coeficiente ϵ de eficiência na construção deve ser considerado, isto é a construção do tecido exige mais assimilado do que aparece na biomassa formada. A_R é uma pequena reserva de assimilado que não está disponível para a construção e $\frac{1}{2} a_{prod}$ é a taxa com que o assimilado estocado pode ser usado para construção.

A *disponibilidade de nitrogênio* para o processo de renovação das folhas e raízes finas é estimado comparando-se o nitrogênio absorvido (*numerador*) com as necessidades de nitrogênio para a construção de folhas e raízes finas (*denominador*):

$$k_{Nfr} = \frac{\frac{1}{2} N_R}{k_A (\epsilon_L I_{dem} + \epsilon_R \Gamma_{dem})} ; \quad (158)$$

onde $\frac{1}{2} N_R$ é a taxa de absorção de nitrogênio, enquanto que ϵ_L e ϵ_R representam o conteúdo específico de nitrogênio nas folhas e raízes finas respectivamente.

A fotossíntese é igualmente afetada pela quantidade de nitrogênio. Para determinar o fator de disponibilidade de nitrogênio k_N que afeta a produção de assimilados a_{prod} , a absorção potencial de nitrogênio é comparada com a demanda de nitrogênio correspondente às componentes da árvore, caso sejam limitadas apenas pelos assimilados. Tem-se:

$$k_N = \frac{\frac{1}{2} N_R}{k_A (\epsilon_L I_{dem} + \epsilon_R \Gamma_{dem}) + \epsilon_F a_F + a_W (b^o_0 + (1 - b^o_i) i) n_{reloc}} \quad (159)$$

Nesta expressão, a_F é a taxa com a qual os assimilados é disponível para o crescimento dos frutos e a_W é a taxa correspondente de incremento da madeira. Se $k_N < 1$; isto apenas

significa que mais crescimento teria ocorrido, caso mais nitrogênio houvesse. Alternativamente, existe mais assimilados disponíveis do que possam ser usados, devido à limitação de nitrogênio. Se este for o caso, a produção pela fotossíntese é reduzida para ficar compatível ao fornecimento de nitrogênio (vide eq.(136)).

9.3.11 Crescimento de folhas, raízes finas e frutos

O crescimento das folhas corresponde à demanda que elas têm, modificada pela disponibilidade de nitrogênio para renovação e disponibilidade de assimilato. Para a taxa de crescimento das raízes finas, faz-se a hipótese de que, embora dependente da disponibilidade de assimilato, esta taxa não seja afetada pela disponibilidade de nitrogênio. Isto explica o fato da árvore responder à diminuição de nitrogênio, procurando manter ou mesmo aumentar a absorção de nitrogênio, e com isto fazer crescer as raízes finas. Tem-se, portanto,

$$l_{cresc} = k_{Nir} k_A l_{dem} \quad (160)$$

$$r_{cres} = k_A r_{dem} \quad (161)$$

A segunda prioridade é atribuída ao crescimento dos frutos. Se estiverem dispostos de assimilados e nitrogênio suficientes, o crescimento dos frutos deve ser proporcional à massa de folhas e produção de frutos por ano (taxa de renovação):

$$f_{cres} = \frac{1}{2} F L \quad (162)$$

Se o assimilato ou o nitrogênio estão limitados, então a taxa de crescimento dos frutos fica limitada por esta substância carente. A taxa da perda de frutos é dada por:

$$f_{perda} = \frac{1}{2} F \quad (163)$$

O incremento é limitado ou pela disponibilidade de assimilados ou pela de nitrogênio. A taxa na qual os assimilados estão disponíveis para o incremento da madeira é estimada deduzindo do estoque corrente A de assimilato, as reservas levando em conta as produções de folhas e raízes finas, assumindo a disponibilidade do uso da taxa de assimilados $\frac{1}{2} A$ e daí deduzindo a taxa usual para folhas, raízes finas e produção de frutos:

$$a_{plus} = A \left[\frac{\frac{1}{2} L + \frac{1}{2} R}{\frac{1}{2} estacao} \right] \frac{1}{2} A \left[(l_{cresc} + r_{cresc} + f_{cresc}) \right] \quad (164)$$

A taxa com que o nitrogênio está disponível para crescimento é estimada deduzindo, da taxa de tomada usual de nitrogênio, a taxa necessária para folhas, raízes finas e produção de frutos:

$$n_{plus} = \frac{1}{2} N \left[\frac{1}{2} L l_{cresc} + \frac{1}{2} R r_{cresc} + \frac{1}{2} F f_{cresc} \right] \quad (165)$$

Em condições de limitação dos assimilados, o incremento se transforma:

$$w_{incre} = a_{plus} \quad (166)$$

com limitação de nitrogênio:

$$w_{incre} = \frac{n_{plus}}{(b^{\circ}_0 + (1 - b)^{\circ}_i)} \quad (167)$$

As perdas de madeira possuem duas componentes. A primeira é devida à morte indi-

vidual de árvores, enquanto que a segunda se deve a perdas de partes de madeira morta de todas as árvores.

$$W_{\text{perda}} = q_{\text{morta}} \frac{W}{Q} + \frac{1}{2} W \quad (168)$$

9.3.12 Variações da altura e do diâmetro

O aumento na massa de madeira, W_{incr} ; é usado para calcular o crescimento individual de uma dada espécie no bosque, do diâmetro e de sua altura. No caso de *existência* de competição entre copas, as árvores crescem em altura até atingir o máximo na razão altura/diâmetro. No caso de não haver *stress* competitivo, as árvores procuram aumentar o seu diâmetro até atingir o mínimo da razão altura/diâmetro. Se o máximo da razão $\frac{H}{D}$ foi atingido em presença de competição com as copas, o crescimento posterior deve continuar mantendo fixo $\frac{H}{D}$. Analogamente, uma árvore isolada continuará crescendo com o valor mínimo de $\frac{H}{D}$ quando esta razão for atingida. O cálculo correto do crescimento da altura e do diâmetro exige o cálculo da derivada com relação ao tempo da massa de carbono de um tronco, assim como a separação das contribuições da altura e do diâmetro. A massa de carbono de um tronco individual é dada por (66) e se escreve:

$$G = \frac{1}{4} \rho \cdot D^2 H \quad (169)$$

A etapa seguinte consiste em derivar esta expressão com relação ao tempo; tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dt} &= \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{4} \rho \cdot D^2 H \right) = \\ &= \frac{1}{4} \rho \cdot \left(2D \frac{dD}{dt} + D^2 \frac{dH}{dt} \right) \end{aligned} \quad (170)$$

onde o coeficiente \hat{A} é definido por:

$$\hat{A} = \frac{1}{4} \rho \quad (171)$$

A expressão para $dG=dt$ deve ser igual ao incremento g do tronco, após se ter levado em conta as perdas por madeira morta W_{perd} , a fração subterrânea da madeira α_U , a fração associada aos galhos α_B e por unidade de troncos:

$$\frac{dG}{dt} = g = [(W_{\text{incr}} - W_{\text{perd}}) (1 - \alpha_U) (1 - \alpha_B)] = Q \quad (172)$$

Usando-se estas equações, os incrementos na altura e no diâmetro, em três situações diferentes, podem ser calculados como segue:

Situação 1) Crescimento com a razão da altura para o diâmetro constante. Neste caso,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{H}{D} \right) = 0 = \frac{1}{D} \frac{dH}{dt} - \frac{H}{D^2} \frac{dD}{dt} \quad (173)$$

donde obtemos:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{H}{D} \frac{dD}{dt} \quad (174)$$

Substituindo em eq.(170) ; tem-se:

$$g = \frac{dG}{dt} = \pi A D^2 \left[2 \frac{H}{D} \frac{dD}{dt} + \frac{dH}{dt} \right] = 3\pi A D^2 \frac{H}{D} \frac{dD}{dt} \quad (175)$$

Portanto, a variação do diâmetro é dada por:

$$\frac{dD}{dt} = \frac{g}{3\pi A D H} \quad (176)$$

Para crescimento na situação 1, no caso de árvore isolada $H=D$ deve ser igual a $(H=D)_{\min}$. No caso de haver competição com as copas $H=D = (H=D)_{\max}$

Situação 2) Árvore isolada com $H=D > (H=D)_{\min}$; neste caso, deve-se ter:

$$\frac{dH}{dt} = 0; \quad (177)$$

de onde se calcula, com eq.(170):

$$\frac{dD}{dt} = \frac{g}{2\pi A D H} \quad (178)$$

Situação 3) Havendo competição com as copas e se $H=D < (H=D)_{\max}$; então a condição de crescimento é:

$$\frac{dD}{dt} = 0 \quad (179)$$

que, após substituída em eq.(170), fornece para o crescimento em altura:

$$\frac{dH}{dt} = \frac{g}{\pi A D^2} \quad (180)$$

Para uso posterior nas equações diferenciais, introduzimos a notação:

$$\frac{dH}{dt} = h_{\text{cresc}} \quad (181)$$

$$\frac{dD}{dt} = d_{\text{cresc}} \quad (182)$$

9.3.13 Constituição da serrapilheira

A serrapilheira é produzida pelo crescimento das árvores, encontra-se sobre o solo e é constituída por folhas, madeira morta e frutos. Quando encontrada abaixo da superfície do solo é denominada *serrapilheira de raízes*. Em seguida, esta serrapilheira é submetida a um processo de decomposição. Por outro lado, sabe-se que uma certa quantidade » é usada como combustível ou fertilizante, e isto diminui a quantidade de serrapilheira para a decomposição.

A taxa de carbono disponível para decomposição na serrapilheira é:

$$c_G = [c_G]^{(1)} + [c_G]^{(2)} + [c_G]^{(3)} + [c_G]^{(4)} \quad (183)$$

onde

$$[c_G]^{(1)} = (1 - i) [(1 - \alpha) l_{\text{perda}} + l_{\text{morta}} + f_{\text{perda}} + f_{\text{mort}}] \quad (184)$$

$$[c_G]^{(2)} = c_G + (1 - i) (1 - i_U) [W (\frac{1}{2} W + (q_{mort}=Q)) + a_{mort}] \quad (185)$$

$$[c_G]^{(3)} = (1 - i - A) r_{perd} + r_{mort} \quad (186)$$

$$[c_G]^{(4)} = i_U [W (\frac{1}{2} W + (q_{mort}=Q)) + a_{mort}] \quad (187)$$

O nitrogênio na serrapilheira, disponível para decomposição, tem a taxa de crescimento:

$$n_G = [n_G]^{(1)} + [n_G]^{(2)} + [n_G]^{(3)} + [n_G]^{(4)} \quad (188)$$

onde

$$[n_G]^{(1)} = (1 - i) [L_{perd} + L_{mort} + F (f_{perd} + f_{mort})] \quad (189)$$

$$[n_G]^{(2)} = (1 - i) [(1 - i_U) W (\frac{1}{2} W + (q_{mort}=Q))] \quad (190)$$

$$[n_G]^{(3)} = R [(1 - i - N) r_{perd} + r_{mort}] \quad (191)$$

$$[n_G]^{(4)} = i_U W (\frac{1}{2} W + (q_{mort}=Q)) \quad (192)$$

onde a quantidade média de nitrogênio na madeira é representada por:

$$W = N_W = W: \quad (193)$$

9.3.14 Leis de conservação para carbono e nitrogênio

Vamos dividir a árvore e o solo em diversos compartimentos k . Durante o processo de simulação, as reservas de carbono e nitrogênio, nos diversos compartimentos, devem ser iguais às reservas iniciais, somadas às trocas (entrada e saída), através das interfaces dos compartimentos. Assim, temos para o compartimento k :

$$C_k(t) = C_{k;0} + C_{k;net} = C_{k;0} + \int_0^t \sum_i C_{ik;in} - \sum_j C_{jk;out} dt \quad (194)$$

$$N_k(t) = N_{k;0} + N_{k;net} = N_{k;0} + \int_0^t \sum_i n_{ik;in} - \sum_m n_{mk;out} dt \quad (195)$$

Estas *condições de contorno* servem igualmente durante a execução da simulação, para testar a auto consistência em cada etapa do cálculo, assim como em cada compartimento. Assim:

$$(C_{k;0} + C_{k;net}) - C_k = 0 \quad (196)$$

$$(N_{k;0} + N_{k;net}) - N_k = 0 \quad (197)$$

9.4 Aspectos puramente matemáticos: conjunto de equações diferenciais

Parte-se da equação diferencial para o número de árvores no bosque $Q(t)$ dada por:

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -i Q(t); \quad (198)$$

onde o coeficiente de mortalidade é definido por (139) e depende da superposição das

copas.

9.4.1 Dinâmica dos troncos: altura e diâmetro

Para o caso 1), onde

$$\frac{H}{D} = \text{const} ;$$

obtem-se as alturas, $H(t)$, e os diâmetros, $D(t)$, a partir das eqs.(174) e (176), como segue. De eq.(174), podemos escrever:

$$\frac{1}{H} \frac{dH}{dt} = \frac{1}{D} \frac{dD}{dt} ; \quad (199)$$

cujas soluções gerais são

$$H(t) = CD(t) ; \quad (200)$$

sendo C uma constante de integração.

Por outro lado, substituindo este resultado em eq.(176), obtém-se a equação diferencial para o diâmetro, sob a forma

$$\frac{dD}{dt} = \frac{g}{3ACD^2} \quad (201)$$

Assim, as eqs.(200) e (201) fornecem $H(t)$ e $D(t)$ para o caso 1.

9.4.2 Dinâmica para as folhas

Para deduzir a equação diferencial que descreve a dinâmica das folhas, parte-se de (54), sendo que a perda das folhas l_{perda} é dada em condições tropicais por $\frac{1}{2}L(1 + \frac{3}{L})$, conforme a eq. (145). Além disso, as folhas mortas são dadas por $\frac{1}{2}L(t)$, de acordo com a eq. (140), enquanto que o crescimento das folhas é dado por eq. (160).

A equação diferencial se escreve, então, como segue:

$$\frac{dL(t)}{dt} = \frac{dL(t)}{dt}^{(1)} + \frac{dL(t)}{dt}^{(2)} + \frac{dL(t)}{dt}^{(3)} \quad (202)$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{dL(t)}{dt}^{(1)} &= k_{NIR} k_A \frac{f}{2f_{\text{fluxo}}} (L_{\text{lim}} - L(t)) + \frac{1}{2}L(1 + \frac{3}{L}) \\ \frac{dL(t)}{dt}^{(2)} &= -\frac{1}{2}L(1 + \frac{3}{L}) \\ \frac{dL(t)}{dt}^{(3)} &= \frac{1}{2}L(t) \end{aligned} \quad (203)$$

A solução de eq.(203) fornece $L(t)$, restando apenas definir os fatores $k_{NIR} k_A$, além de $\frac{1}{2}f_{\text{fluxo}}$, $\frac{3}{L}$, $\frac{1}{2}L$ e $\frac{1}{2}$. Vamos agora iniciar com o coeficiente k_{NIR} definido por:

$$\begin{aligned} k_{NIR} &= \frac{\frac{1}{2}N R}{k_A (\frac{1}{2}L_{\text{dem}} + \frac{1}{2}R_{\text{dem}})} = \\ &= \frac{f}{k_A (\frac{1}{2}f_{\text{fluxo}} (L_{\text{lim}} - L(t)) + \frac{1}{2}R (1 + \frac{3}{R}) R(t) + \frac{1}{2}f_{\text{fluxo}} (\frac{1}{2}L_{\text{lim}} - R(t)))} \end{aligned} \quad (204)$$

Resta ainda introduzir a quantidade k_A definida por:

$$k_A(t) = \frac{(A(t) - A_R) \frac{1}{2} a_{\text{prod}}(t) + a_{\text{resp}}(t)}{I_{\text{dem}}(t) + r_{\text{dem}}(t)} \quad (205)$$

onde o denominador $I_{\text{dem}}(t) + r_{\text{dem}}(t)$ é dado por:

$$\frac{1}{2} f_{\text{fluxo}} (L_{\text{lim}} - L(t)) + \frac{1}{2} L (1 + \beta_L) L(t) + \frac{1}{2} R (1 + \beta_R) R(t) + \frac{1}{2} f_{\text{fluxo}} (s_{RL} L_{\text{lim}} - R(t)) \quad (206)$$

envolvendo ainda

$$a_{\text{prod}} = 2.389 k_{Tp} k_N^2 i_1 i_3 p_s [(1 - i_1) p_{c0} + i_1 p_{c1}] \quad (207)$$

e

$$a_{\text{resp}} = k_{Tr} \frac{\mu}{\beta_L} i_1 \frac{h}{24} L(t) + \frac{1}{4} w b W(t) + \frac{1}{4} f_{\text{LF}} F(t) + k_{Ts} \frac{1}{4} R(t) \quad (208)$$

Note-se o caráter *extremamente não linear* da equação (203), onde diversas variáveis de estado estão acopladas.

9.4.3 Dinâmica das raízes finas

Esta equação diferencial *apresenta algumas semelhanças* com a *anterior*, apresentando-se sob a forma:

$$\frac{dR(t)}{dt} = \frac{dR(t)}{dt}^{(1)} + \frac{dR(t)}{dt}^{(2)} + \frac{dR(t)}{dt}^{(3)} \quad (209)$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{dR(t)}{dt}^{(1)} &= k_A(t) [\frac{1}{2} R (1 + \beta_R) R(t) + (s_{RL} L_{\text{lim}} - R(t))] \frac{1}{2} f_{\text{fluxo}} \\ \frac{dR(t)}{dt}^{(2)} &= -i_1 \frac{1}{2} R (1 + \beta_R) R(t) \\ \frac{dR(t)}{dt}^{(3)} &= -i_1 R(t) \end{aligned} \quad (210)$$

9.4.4

9.4.5 Dinâmica para os frutos

Esta é uma equação diferencial de resolução mais simples:

$$\frac{dF(t)}{dt} = \frac{1}{2} f_{\text{FL}} L(t) - \frac{1}{2} F(t) - i_1 F(t) \quad (211)$$

9.4.6 Dinâmica para os assimilados

A dinâmica para os assimilados é dada pela seguinte expressão:

$$\frac{dA(t)}{dt} = \frac{dA(t)^{(1)}}{dt} + \frac{dA(t)^{(2)}}{dt} + \dots + \frac{dA(t)^{(7)}}{dt}; \quad (212)$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{dA(t)^{(1)}}{dt} &= 2:389k_{Tp}k_N^2 i_1 i_3 \phi_s [(1 i_1) p_{c0} + p_{cl}] \\ \frac{dA(t)^{(2)}}{dt} &= \mu_A [\frac{1}{2}L (1 + \frac{1}{3}L) L(t) + \frac{1}{2}R (1 + \frac{1}{3}R) R(t)] \\ \frac{dA(t)^{(3)}}{dt} &= i_1 k_{Tr} \frac{1}{4}L i_1 \frac{h}{24} L(t) + \frac{1}{4}W bW(t) + \frac{1}{4}F \dot{L} F(t) \\ \frac{dA(t)^{(4)}}{dt} &= i_1 k_{Ts} \frac{1}{4}R R(t) i_1 \frac{1}{2}F_{sFL} L(t) i_1 A(t) i_1 \frac{\frac{1}{2}L L(t) + \frac{1}{2}R R(t)}{\frac{1}{2}estacao} \frac{3}{4} \frac{1}{2}A \\ \frac{dA(t)^{(5)}}{dt} &= i_1 \frac{1}{k_{NIr}k_A} \frac{1}{2}L (1 + \frac{1}{3}L) L(t) + (L_{lim} i_1 L(t)) \frac{1}{2}fluxo \\ \frac{dA(t)^{(6)}}{dt} &= \frac{1}{k_A} \frac{1}{2}R (1 + \frac{1}{3}R) R(t) + (R_{lim} i_1 R(t)) \frac{1}{2}fluxo \\ \frac{dA(t)^{(7)}}{dt} &= i_1 f k_{NIr}k_A l_{dem} + k_A r_{dem} + \frac{1}{2}F_{sFL} F(t)g \end{aligned} \quad (213)$$

nas quais foram definidas, para tornar mais explícitas, as seguintes grandezas:

$$l_{dem} = \frac{1}{2}L (1 + \frac{1}{3}L) L(t) + (L_{lim} i_1 L(t)) \frac{1}{2}fluxo \quad (214)$$

$$r_{dem} = \frac{1}{2}R (1 + \frac{1}{3}R) R(t) + (R_{lim} i_1 R(t)) \frac{1}{2}fluxo \quad (215)$$

9.4.7 Dinâmica do carbono na serrapilheira

Obtém-se a seguinte equação de movimento:

$$\frac{dC_G(t)}{dt} = \frac{dC_G(t)^{(1)}}{dt} + \frac{dC_G(t)^{(2)}}{dt} + \frac{dC_G(t)^{(3)}}{dt} + \frac{dC_G(t)^{(4)}}{dt} \quad (216)$$

onde foram definidas as contribuições:

$$\begin{aligned} \frac{dC_G(t)^{(1)}}{dt} &= (1 i_1) [(1 i_1) \mu_A \frac{1}{2}L (1 + \frac{1}{3}L) L(t) + \frac{1}{2}L(t) + (\frac{1}{2}F + 1) F(t)] \\ \frac{dC_G(t)^{(2)}}{dt} &= (1 i_1) (1 i_1) [W(t) (\frac{1}{2}W + 1) + \frac{1}{2}A(t)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_G(t)}{dt} &= [(1 - \alpha) \frac{1}{2} R(t) + R(t)] \\ \frac{dC_G(t)}{dt} &= \rho_U [W(t) (\frac{1}{2} W + 1)] + \alpha A(t) - \frac{1}{2} k_{TS} C_G(t) \end{aligned} \quad (217)$$

9.4.8 Dinâmica do carbono em matéria orgânica no solo

O carbono, sob forma de matéria orgânica no solo, $C_S(t)$, satisfaz a seguinte equação diferencial:

$$\frac{dC_S(t)}{dt} = \hat{A} \frac{1}{2} k_{TS} C_G(t) - \frac{1}{2} k_{min} C_S(t) \quad (218)$$

9.4.9 Dinâmica do nitrogênio na serrapilheira da floresta

A equação diferencial que se obtém é:

$$\frac{dN_G(t)}{dt} = \frac{dN_G(t)}{dt}^{(1)} + \frac{dN_G(t)}{dt}^{(2)} + \frac{dN_G(t)}{dt}^{(3)} + \frac{dN_G(t)}{dt}^{(4)} \quad (219)$$

onde as diversas contribuições são:

$$\begin{aligned} \frac{dN_G(t)}{dt}^{(1)} &= (1 - \alpha) [\rho_{L0} \frac{1}{2} L(t) + \rho_L L(t)] \\ \frac{dN_G(t)}{dt}^{(2)} &= (1 - \alpha) [\rho_F (\frac{1}{2} F(t) + F(t)) + (1 - \rho_U) \rho_W W(t) (\frac{1}{2} W + 1)] \\ \frac{dN_G(t)}{dt}^{(3)} &= \rho_R [(1 - \alpha) \frac{1}{2} R(t) + R(t)] \\ \frac{dN_G(t)}{dt}^{(4)} &= \rho_U \rho_W W(t) (\frac{1}{2} W + 1) - \frac{1}{2} k_{TS} N_G(t) \end{aligned} \quad (220)$$

9.4.10 Dinâmica do nitrogênio em matéria orgânica no solo

A equação para $N_S(t)$ é dada por

$$\frac{dN_S(t)}{dt} = 2 \hat{A} \frac{1}{2} k_{TS} \frac{N_S}{C_S} C_G(t) - \frac{1}{2} k_{TS} N_G(t) \quad (221)$$

para a resolução da qual pressupõe-se a obtenção prévia da solução de eq.(219) com eq.(220) para $N_G(t)$, além daquelas anteriormente apresentadas para $C_G(t)$.

9.4.11 Dinâmica do nitrogênio no solo disponível para as plantas

A equação de movimento para $N(t)$ se escreve:

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{dN(t)}{dt}^{(1)} + \frac{dN(t)}{dt}^{(2)} + \frac{dN(t)}{dt}^{(3)} + \frac{dN(t)}{dt}^{(4)}$$

onde

$$\begin{aligned} \frac{dN(t)}{dt} &= n_{precip} + \frac{1}{2} k_{Ts} N_S(t) \\ \frac{dN(t)}{dt} &= \frac{1}{2} k_{dec} k_{Ts} N_G(t) - \frac{1}{2} k_{lixiv} N(t) \\ \frac{dN(t)}{dt} &= \frac{1}{2} \hat{A} \frac{1}{2} k_{dec} k_{Ts} \frac{\mu N_S}{C_S} C_G(t) \\ \frac{dN(t)}{dt} &= n_{fix\ max} k_{Ts} \frac{\mu}{\alpha_{max}} S + n_{up} \end{aligned} \quad (222)$$

Por outro lado, n_{up} é dado por (133):

$$n_{up} = \alpha_L l_{cresc} + \alpha_R r_{cresc} + \alpha_F f_{cresc} + W_{incre} [b^{\alpha_0} + (1 - b)^{\alpha_i}] + n_{reloc} \quad (223)$$

onde, conforme determinado anteriormente, tem-se

$$l_{cresc} = k_{Nl} k_A \frac{1}{2} L (1 + \alpha_L) L(t) + (L_{lim} - L(t)) \frac{1}{2} f_{fluxo} \quad (224)$$

$$r_{cresc} = k_A \frac{1}{2} R (1 + \alpha_R) R(t) + (R_{lim} - R(t)) \frac{1}{2} f_{fluxo} \quad (225)$$

$$f_{cresc} = \frac{1}{2} f_{FL} L(t) \quad (226)$$

enquanto que

$$W_{incre} = \frac{1}{2} \mu A(t) \frac{\frac{1}{2} L(t) + \frac{1}{2} R(t)}{\frac{1}{2} estacao} \frac{1}{2} A + \frac{1}{2} (l_{cresc} + r_{cresc} + f_{cresc}) \quad (227)$$

e

$$n_{reloc} = (\alpha_L - \alpha_{Lvelha}) l_{perda} + \alpha_R n r_{perda} \quad (228)$$

9.4.12 Dinâmica da madeira

$$\frac{dW(t)}{dt} = \frac{1}{2} \mu A(t) \frac{\frac{1}{2} L(t) + \frac{1}{2} R(t)}{\frac{1}{2} estacao} \frac{1}{2} A + \frac{1}{2} (l_{cresc} + r_{cresc} + f_{cresc}) - (1 + \frac{1}{2} W) W(t) \quad (229)$$

9.4.13 Dinâmica do nitrogênio na madeira

$$\frac{dN_W(t)}{dt} = W_{incre} [b^{\alpha_0} + (1 - b)^{\alpha_i}] - \alpha_W (1 + \frac{1}{2} W) W(t) \quad (230)$$

onde W_{incre} é definido por 227.

9.5 Sensibilidade aos parâmetros e parametrização adotada

Estudos da sensibilidade da simulação aos parâmetros utilizados são feitos pelos métodos usuais. Foi usado um conjunto de valores iniciais razoáveis e aplicáveis ao “spruce”; este

é um tipo de árvore da espécie *Picea abies*, árvore conífera da família do pinheiro, típica de climas temperados da Europa Central, tendo folhas aciculares. As simulações representam um bosque de “spruce” em terreno fértil. Parte-se de configurações do seguinte tipo: no ano 0 tem-se árvores de 1,5m, e 5:000 árvores por hectare; chegando próximo à maturidade (ano 100), o bosque passa por quatro cortes de árvores em que 50% das árvores são removidas nos anos respectivamente 20, 35, 50 e 65. Em alguns cálculos numéricos com o programa, varia-se cada um dos parâmetros usando-se cinco incrementos idênticos, correspondentes à região de interesse, usualmente de 50% até 250%. Os outros parâmetros são mantidos fixos. Efetuam-se cálculos comparativos usando um conjunto de cinco valores diferentes dos parâmetros. Tais cálculos fornecem uma indicação da sensibilidade da simulação às incertezas nos valores dos parâmetros em estudo. Outros estudos foram feitos com a acácia (*Acacia auriculaeformis*) em climas temperados (Sul da China). Vamos apresentar o resultado de alguns desses estudos, sob forma de tabela:

Parâmetros sensíveis da árvore

1. μ_C : razão do diâmetro da copa para o diâmetro do tronco ($m=m$)
2. p_{max} : máximo valor da fotossíntese ($mg_{CO_2}dm^{-2}h^{-1}$)
3. θ : inclinação inicial da curva de fotossíntese ($mg_{CO_2}dm^{-2}h^{-1}W^{-1}m^2$)
4. $\cdot (j)$: coeficiente de extinção da luz
5. T_{opt} : temperatura que corresponde ao máximo de fotossíntese ($^{\circ}C$)
6. $\frac{3}{4}$: taxa de respiração das folhas (ano^{-1})
7. $\frac{3}{4}_W$: taxa de respiração da madeira (ano^{-1})
8. $\frac{3}{4}_R$: taxa de renovação das raízes finas (ano^{-1})
9. $^1_{coppa}$: mortalidade da copa (ano^{-1})

Parâmetros sensíveis do bosque

1. T_{avg} : temperatura média anual ($^{\circ}C$)
2. T_{amp} : temperaturas máxima verão e mínima inverno ($^{\circ}C$)
3. $!$: fração de dias encobertos.
4. η_{prec} : absorção de nitrogênio por deposição ($tNha^{-1}ano^{-1}$)
5. C_S : carbono inicial em matéria orgânica do solo (humus no solo) ($tC=ha$)
6. N_S : nitrogênio inicial em matéria orgânica do solo (humus no solo) ($tN=ha$)
7. \hat{A} : razão de humificação
8. $\frac{1}{2}_{lixivia}$: lixiviação de nitrogênio disponível para plantas (ano^{-1})

Parâmetros sensíveis de gerenciamento e de poluição

1. Q : número inicial de árvores (densidade de plantio) (n)
2. m : fração do corte de madeira

3. i : intervalo de corte de árvores (ano)
4. e : fim do corte de árvores (ano)
5. 3P : prejuízo na fotossíntese (%)
6. t_P : momento em que começam os efeitos da poluição

9.6 Modelagem com ajustes otimizados dos parâmetros

O processo de ajuste corresponde a escolha de parâmetros que forneçam o melhor acordo possível entre as observações experimentais e os resultados da modelagem. O modelo dos processos, parametrizado desta forma, vai ter validade de comportamento (uma representação válida da estrutura e dos processos), da mesma forma de uma validade empírica em um largo espectro excedendo aquele das observações usadas para o ajuste dos parâmetros. O método dos algoritmos genéticos (Barth, 1994) (Ref. 12.2 - 1) foi usado para ajustar de maneira ótima os dados obtidos por Schober; envolve nove parâmetros sensíveis e não conhecidos suficientemente (p_{max} , θ ; i ; s_c , $1/2L$; $1/2R$; $1/2lixiv$; $3/4L$; $3/4W$). Como era de se esperar, os resultados deste modelo ajustado concordam melhor com os dados de Schober do que aqueles obtidos pelo modelo não fitado. Note-se que todos os valores dos parâmetros encontrados pelo procedimento de ajuste encontram-se dentro dos limites permitidos pela ecofisiologia das árvores. Isto pode ser considerado como uma indicação da validade estrutural do modelo.

9.6.1 Efeitos da poluição: produção reduzida e colapso

A poluição pode afetar o crescimento das árvores de diversas formas, entre elas: redução da fotossíntese, envelhecimento prematuro das folhas aciculares, aumento da perda de folhas, aumento da necessidade de reconstituição das raízes finas. Enquanto que os dois primeiros implicam uma acumulação reduzida de energia, os dois outros causam um aumento de consumo de energia. O resultado final no balanço de energia é o mesmo: a redução do excesso de assimilados. Se a taxa na qual o fotossintato é produzido se torna menor que a taxa de consumo, a árvore não vai ter condições para satisfazer todas as suas necessidades de renovação para folhas e raízes finas; a produção decresce mais e a árvore eventualmente pode morrer. As árvores, portanto, podem exibir três diferentes modos de comportamento dinâmico (Bossel, 1986) (Ref. 12.2 - 2):

- 1) *crescimento normal*;
- 2) *estagnação*;
- 3) *colapso*.

A sensibilidade do desenvolvimento do bosque, à perturbação do parâmetro de fotossíntese pela poluição, iniciou-se no ano de 1944. Para valores subcríticos dos danos (${}^3P < 50\%$), o bosque continua crescendo, embora a uma taxa reduzida. Se os danos aumentam, existe um intervalo no qual o bosque apenas consegue manter a sua biomassa sem nenhum crescimento a mais (${}^3P = 55\%$). Durante este processo, existe um ajuste da massa das folhas e das raízes finas para um valor menor, o que apenas satisfaz as necessidades de conservação. Se os danos atingem um valor crítico, ${}^3P = 60\%$; o bosque rapidamente colapsa. Se necessidades de renovação para folhas e raízes finas não podem

ser cobertas, a sua massa decresce, a produção decresce mais ainda, a falta de assimilados fica ainda mais crítica e essa descida em espiral acelerada provoca um rápido colapso.

9.6.2 Efeitos climáticos: latitude e temperatura

Uma das características mais importantes desta simulação é a inclusão de variações sazonais e diurnas, da intensidade da luz, da duração do dia, da temperatura, e a dependência da posição do Sol com o tempo e com a latitude. Este modelo contém, portanto, os requisitos necessários para estudar aspectos associados à fenologia (em botânica, fenologia é a parte que estuda os diversos fenômenos periódicos das plantas, tais como a brotação, a floração e a frutificação, atribuindo-lhes épocas e características; note-se que, em biologia geral, este mesmo termo é empregado para os processos biológicos relacionados com o clima.). Dessa maneira esta modelagem permite estudar os efeitos da latitude, assim como as mudanças climáticas, e isto, associado a modelagens em escala maior (tipo escalas globais), permite estudos de mudanças globais. A dependência com a latitude dos efeitos de irradiação na fotossíntese tem implicações na variação sazonal da produção e disponibilidade dos assimilados. Os efeitos de temperatura definem a fenologia (a atividade das raízes finas assim como circulação de água nas folhas e queda das folhas), afetando a eficiência da fotossíntese, da respiração dos componentes da árvore e a taxa de mineralização da serrapilheira e do humus. Alguns efeitos microclimáticos estão implícitos na formulação matemática para a radiação na copa e na temperatura do solo.

A sensibilidade dos resultados à variação de temperatura fica evidente em gráficos da quantidade total de acumulação do carbono no sistema florestal. O carbono é requerido pelo ecossistema apenas durante a fase de crescimento, após o *envelhecimento* (no ano 100). O carbono acumulado na biomassa do caule é removido imediatamente, enquanto que a folha e a serrapilheira das raízes, assim como os ramos e os cepos são decompostos gradualmente enquanto a decomposição da serrapilheira e do humus permanece a fonte de carbono por muitas décadas. Modelagens como estas podem ser usadas para estudar fenômenos semelhantes da mudança de clima no crescimento da floresta e o carbono requerido. Note-se que as grandes perdas com a respiração em climas mais quentes são largamente compensados pelo aumento da produção, devido à soma total da radiação anual. As modelagens apresentam ótimos resultados (para um dado conjunto de parâmetros) para uma temperatura anual média de 6 a 9 °C. Para temperatura mais baixas, a produção sofre, enquanto que para temperaturas mais altas a respiração aumenta ao ponto em que o balanço total de energia fica menos favorável e o crescimento diminui novamente. Para uma temperatura média de 15 °C, o modelo mostra uma redução muito significativa. Note que esse estudo de sensibilidade implica parâmetros constantes (em particular, latitude constante); em geral a latitude e a temperatura anual média devem ser mudadas simultaneamente.

9.7 Possibilidades de generalização do modelo

Algumas possibilidades de aperfeiçoamento desta modelagem são as seguintes:

² Empregar um módulo de simulação dos efeitos da água do solo. Este módulo deve conter: *precipitação, infiltração, transbordamento, capilaridade, absorção pelas raízes e transpiração.*

² Incluir dinâmica de nutrientes: caso do magnésio, cálcio, potássio.

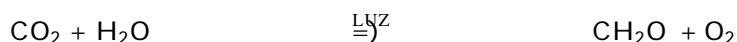
² Utilizar modelos mais detalhados para a decomposição, considerando a descrição dos processos bioquímicos, efeitos de microorganismos, temperatura, umidade e acidez do solo (pH).

² Adotar um modelo para a química do solo descrevendo os processos essenciais especialmente para os nutrientes, efeito da temperatura, água do solo, deposição seca e úmida de compostos químicos e acidez do solo.

10. Introdução à fotossíntese

Diversos textos estão disponíveis para o estudo da fotossíntese. Nesta seção, adotaremos a descrição contida nas referências: U. Lüttge, M. Kluge e G. Bauer, *Botanique*, e D. Voet e J. Voet, *Biochemistry*.

É sabido que a vida na Terra depende criticamente do Sol. As plantas e algumas cianobactérias absorvem energia da luz através de um processo em que o CO_2 é fixado, para então produzir carboidratos CH_2O . A reação é a seguinte (a mais comum):



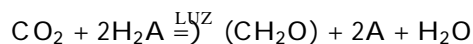
Estima-se que a fotossíntese fixa anualmente 10^{11} toneladas de carbono, o que vem a significar um armazenamento de energia correspondente a 10^{18} kJ de energia. Além disso, durante longo tempo, a fotossíntese produziu o O_2 da atmosfera terrestre.

10.1 Reações da luz

No início deste século, era usualmente aceito que a luz absorvida pelos pigmentos fotossintéticos reduzia o CO_2 , o qual, por sua vez, se combinava com H_2O para formar o carboidrato. Nesta visão primitiva, CO_2 era a fonte de O_2 gerado pela fotossíntese. Em 1931, Cornelis e van Niel foram capazes de mostrar que as *bactérias verdes* fotossintéticas anaeróbicas usam ácido sulfídrico na fotossíntese para produzir o enxofre S.

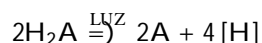


A similaridade do comportamento acima química envolvendo H_2S e H_2O sugeriu a van Niel a reação fotossintética geral:

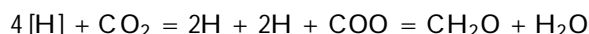


H_2A ; na reação acima, é H_2O ; nas plantas verdes e cianobactérias, ou H_2S ; em bactérias fotossintéticas sulfurosas. Esta observação sugeriu que a fotossíntese é um processo em duas etapas:

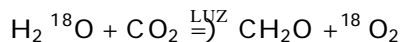
a)



b)



Dirimir dúvidas quanto à origem do O_2 só foi possível quando o isótopo de oxigênio ^{18}O ficou disponível para experimentos. A demonstração experimental de que a fonte de O_2 na fotossíntese é a H_2O se fez da seguinte maneira:



A transferência, portanto, do oxigênio da água para formar o oxigênio molecular é o que foi observado por S. Ruben e M. Kamen, em 1941.

10.1.1 A absorção de luz

O principal fotoreceptor na fotossíntese é a clorofila vermelha; trata-se de um tetrapirrólíio cíclico parecido com os grupos heme das globinas e dos citocromos e é obtido biossinteticamente a partir da protoporfirina. A clorofila, portanto, difere dos hemes em diversos aspectos, o mais simples, sendo o átomo central Mg^{2+} em vez de Fe^{II} ou Fe^{III} como nas porfirinas de Ferro.

10.1.2 Interação luz-matéria: caminhos complexos

Apenas para relembrar alguns pontos bem conhecidos.

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (231)$$

onde a constante de Plank é dada por $6.626 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$; e a velocidade da luz é $2.998 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ no vácuo, ν é a frequência da radiação e λ o comprimento de onda. A luz visível exibe comprimento de onda entre 400 e 700nm. Por outro lado, convém introduzir um einstein, que corresponde a um mol de fótons. Em termos de energia, a luz vermelha com $\lambda = 700\text{nm}$ possui $141\text{kJ einstein}^{-1}$: As moléculas e os átomos possuem diversos estados eletrônicos quânticos, com diferentes energias. No caso particular de moléculas, na medida em que contém vários núcleos, cada estado eletrônico encontra-se associado a uma série de estados rotacionais e vibracionais, que podem se encontrar próximos em energia.

A absorção de luz por uma dada molécula se faz pela promoção de um elétron, a partir do estado fundamental. Uma dada molécula só pode absorver fótons, de tal maneira que, a diferença de energia dos níveis ΦE seja igual à energia do foton, dada por $\Phi E = h\nu$. Por outro lado, a luz absorvida por uma dada substância, com determinado comprimento de onda, deve satisfazer a Lei de Beer-Lambert:

$$I = I_0 e^{-\epsilon c \ell} \quad (232)$$

Na expressão acima, I_0 e I são respectivamente a luz incidente e a luz transmitida, c é a concentração molar da amostra, em substâncias absorvedoras, ℓ é o caminho percorrido pela luz na amostra em cm e finalmente ϵ é o coeficiente de extinção molecular. Conseqüentemente, um gráfico de ϵ para uma dada molécula é indicativo da estrutura eletrônica. Os diversos tipos de clorofila são moléculas altamente conjugadas, que absorvem intensamente a luz visível. Uma molécula eletronicamente excitada pode vir a dissipar a sua energia de excitação de diversas maneiras. Os modos de maior interesse para a fotossíntese são os seguintes:

- 1) conversão interna; 2) fluorescência; 3) transferência excitônica; 4) fotooxidação.

1) *Conversão interna*: este é o modo usual de decaimento, em que a energia eletrônica é convertida em energia cinética do movimento molecular. A escala de tempo deste processo é $< 10^{-11}\text{s}$. Através deste processo, as moléculas de clorofila usualmente decaem para os seus estados excitados mais baixos.

2) *Fluorescência*: uma molécula excitada eletronicamente decai ao seu estado fundamental, emitindo um fóton. Este processo ocorre em uma escala de 10^{-8}s , portanto, muito

mais lento do que o processo de conversão interna. A fluorescência é a responsável por apenas de 3% a 6% da dissipação da luz absorvida pelas plantas vivas.

3) *Transferência excitônica*, também chamada *transferência ressonante de energia*: neste caso, a molécula excitada transfere diretamente a sua energia de excitação para as moléculas vizinhas não excitadas, se tais moléculas possuírem estruturas eletrônicas semelhantes. Este processo ocorre através de interações entre orbitais moleculares das moléculas participantes. Uma excitação excitônica pode ser transferida em cadeia entre os membros de um grupo de moléculas. Será visto adiante que o processo de *transferência excitônica* é de particular importância para tunelar energia luminosa para centros de reação fotossintética.

4) *Fotooxidação*: se uma molécula doadora for excitada luminosamente, então ela pode se oxidar e transferir um elétron para uma molécula aceitadora, que, por sua vez, fica *reduzida*. Este processo ocorre porque o elétron transferido está menos fortemente ligado ao doador no seu estado excitado do que se encontra no seu estado fundamental. Na fotossíntese, a clorofila excitada designada por Chl^* constitui este doador. A energia do fóton absorvido é, portanto, transferida para o *centro de reação fotossintética*.

10.2 Espectros de absorção da clorofila e dos pigmentos acessórios

Os pigmentos fotossintéticos podem ser classificados em duas categorias:

a) pigmentos fotossintéticos *primários*

b) pigmentos fotossintéticos *acessórios*

Os pigmentos primários participam diretamente do processo fotoquímico de fotossíntese. No caso dos vegetais superiores, as algas e as cianobactérias, assim como a bacteriófila, no caso de bactérias, são considerados *pigmentos fotossintéticos primários*. Em alguns vegetais superiores, assim como em alguns tipos de algas, tem-se dois tipos de clorofila: a *clorofila b*, além da *clorofila a*. A *razão* de concentração destas clorofilas *a/b* é de 3/1. No entanto é importante notar que a clorofila *b* é apenas um pigmento acessório. Os *pigmentos acessórios* não fazem parte, no sentido estrito do termo das componentes da cadeia de reações fotoquímicas constituindo a fotossíntese. Entretanto, estes pigmentos acessórios aumentam a capacidade de absorção dos quanta de luz. Os carotenóides são pigmentos acessórios assim como a clorofila *b*. As algas vermelhas e as cianobactérias possuem pigmentos acessórios que pertencem à classe das *ficobilinas*, a *ficocianina* e a *ficoeritrina*. Os pigmentos primários e acessórios são organizados em forma de antena coletora, nas membranas tilacoidais. Uma tal organização permite grande eficiência na transferência de energia. Os carotenos e os xantófilos são, respectivamente, os vermelhos e os amarelos. Nos cloroplastos das plantas superiores, a cor de tais pigmentos acessórios fica mascarada pela cor verde da clorofila e, portanto, são pouco visíveis.

Como um contra exemplo, nos cloroplastos fotossintéticos de certos grupos de algas, a concentração de carotenóides pode ser tão grande que a clorofila fica mascarada, e isto lhes confere uma cor que passa do amarelo para o marron. Este é o caso em particular das algas siliciosas e as algas marrons, cujos plastos são ricos em *fucoxantina*, uma xantofila cujo nome provém das algas marrons, *fucus*. A ficocianina e a ficoeritrina coexistem em diversos casos, porém, em proporções diferentes segundo as espécies. A ficoeritrina vermelha é

10.3 Os fotossistemas

Está bem estabelecido que as moléculas de pigmentos fotossintéticos se agrupam em forma de antenas coletoras nas membranas tilacoidais, buscando desta forma mais eficiência na captação de fótons. Note-se que, além dos diferentes complexos clorofila a - proteínas, os pigmentos acessórios também fazem parte das antenas coletoras. Por definição, as antenas coletoras são denominadas *fotossistemas*. Conforme é usual em antenas, um fotossistema é constituído de duas unidades funcionais: pigmentos coletores (pigmentos de antena) e pigmentos centro-reacionais do fotossistema. O funcionamento da antena coletora pode ser descrito como segue: uma molécula de pigmento, excitada por absorção de um fóton, pode transmitir a excitação para uma molécula vizinha, a qual passa então para o primeiro estado singleto. Esta transferência de energia se faz de molécula em molécula, através de um “caminho” na rede, constituída pelas moléculas excitáveis. Devido à configurações geométricas, a excitação acaba chegando ao pigmento reacional, este último passando então a um estado excitado; este processo ocorre em 10^{10} s e com perda quase nula. Isto se deve a um arranjo muito compacto de pigmentos na membrana tilacoidal. Novamente, visto que a transmissão de energia para um vizinho se faz em 10^{12} s, a transferência ou “hopping” é favorecida com relação à fluorescência, que exige 10^{10} s. Por esta razão, as perdas por fluorescência são muito pequenas. O processo de hopping acaba quando o pigmento “armadilha” é excitado, ganhando desta forma um elétron em nível excitado. Uma particularidade especial da armadilha é que o elétron excitado pode ser transferido para um receptor apropriado (isto faz com que a armadilha seja um elemento redox). Com isto, ele reduz o aceitador, liberando um elétron (age como um redutor) e, ao mesmo tempo, o outro é oxidado. O *déficit* de um elétron, criado pela oxidação da armadilha, é em seguida compensado por um doador de elétrons.