



## IMPLEMENTAÇÃO EM R E TESTES DO MODELO CENTURY DE MATÉRIA ORGÂNICA DO SOLO

Pedro Machado Martins **Leão**<sup>1</sup>; Luís Gustavo **Barioni**<sup>2</sup>; Jair **Bortolucci Junior**<sup>3</sup>; Raul Augusto **Teixeira**<sup>4</sup>

Nº 21608

**RESUMO** – Este trabalho teve o objetivo de gerar uma versão recodificada do modelo biogeoquímico Century de forma a dar autonomia para adaptações e acoplamento com outros modelos, como por exemplo, simuladores de crescimento e produção de culturas agrícolas desenvolvidos na Embrapa Informática Agropecuária e facilitar procedimentos de avaliação, calibração, metamodelagem e a aplicação de algoritmos de assimilação de dados. O código-fonte do modelo original foi obtido em linguagem Fortran na versão 4.0 foi vertido para linguagem R, utilizando o pacote deSolve para resolução de equações diferenciais. O programa original usa de equações de diferença para a atualização do estado do sistema e não possui formalismo de identificação dos fluxos ou de equações diferenciais, frequentemente usando valores temporários do estado do sistema ao longo dos cálculos. Inicialmente a versão em R utilizou, sempre que possível, o mesmo formalismo do Century para fins de comparação e rastreamento. Porém, um formalismo mais rigoroso foi adotado para a implementação final, identificando-se os fluxos explicitamente e utilizando-se álgebra matricial para transições de estado sempre que possível para promover ganhos de desempenho computacional na linguagem R. A implementação em R lê parâmetros, variáveis exógenas e valores iniciais de estado dos arquivos no mesmo padrão que o Century original e gera resultados praticamente idênticos aos da implementação original. Além disso, implementou-se a dinâmica do nitrogênio no solo, porém os resultados obtidos foram discrepantes com o modelo original, sendo necessária sua correção.

**Palavras-chaves:** Matéria orgânica do solo, Linguagem R, Modelo Century, Modelo Biogeoquímico.

1 Autor, Bolsista CNPq (PIBIC): Graduação em Engenharia de Computação, UNICAMP, Campinas-SP; pedromleao@gmail.com

2 Orientador: Pesquisador da Embrapa Informática Ambiental, Campinas-SP; luis.barioni@embrapa.br

3 Colaborador, Programador na Embrapa Informática Agropecuária, Campinas-SP

4 Colaborador, Estagiário da Embrapa Informática Agropecuária, Graduação em Matemática Aplicada e Computacional, UNICAMP, Campinas-SP



**ABSTRACT** – *This work aimed to recode the Century biogeochemical model to provide autonomy for adaptations and coupling with other models, such as crop simulation models developed at Embrapa Agricultural Informatics. The recoded version also facilitates evaluation, calibration, metamodeling and the application of data assimilation algorithms. The source code of Century 4.0 originally in Fortran was translated into R scripts. The original program uses difference equations to update the system state and does not have a formalism for identifying flows or differential equations, often using temporary values of the system state variables throughout the calculations. Initially the R version used, whenever possible, the same formalism as the Century for comparison and tracking purposes. However, a more rigorous formalism was adopted for the final implementation, identifying the flows explicitly, applying matrix algebra for state transitions whenever possible and using a differential equations solver available in the deSolve R package. The implementation in R reads parameters, variables exogenous and initial state values from the files in the same pattern as the original Century and yields results virtually identical to the original implementation. In addition, the dynamics of nitrogen in the soil was implemented, but the results obtained were different from the original model, so its correction is still ongoing.*

**Keywords:** Soil organic matter, R Language, Century model, Biogeochemical model.

## 1. INTRODUÇÃO

Como discutido por Stockmann (2013), o solo mundial contém aproximadamente 2344 bilhões de toneladas de carbono orgânico e entender como essa quantidade de carbono muda com o tempo e com as ações humanas é de suma importância, pois a transferência de uma pequena proporção do carbono do solo para a atmosfera na forma de CO<sub>2</sub> pode impactar significativamente o clima global. Além disso, a quantidade de carbono no solo influencia de diversas formas a produção vegetal e o entendimento de como os estoques de carbono variam com o tempo pode ajudar a planejar uma agricultura mais eficiente, mais resiliente e menos danosa ao meio ambiente.

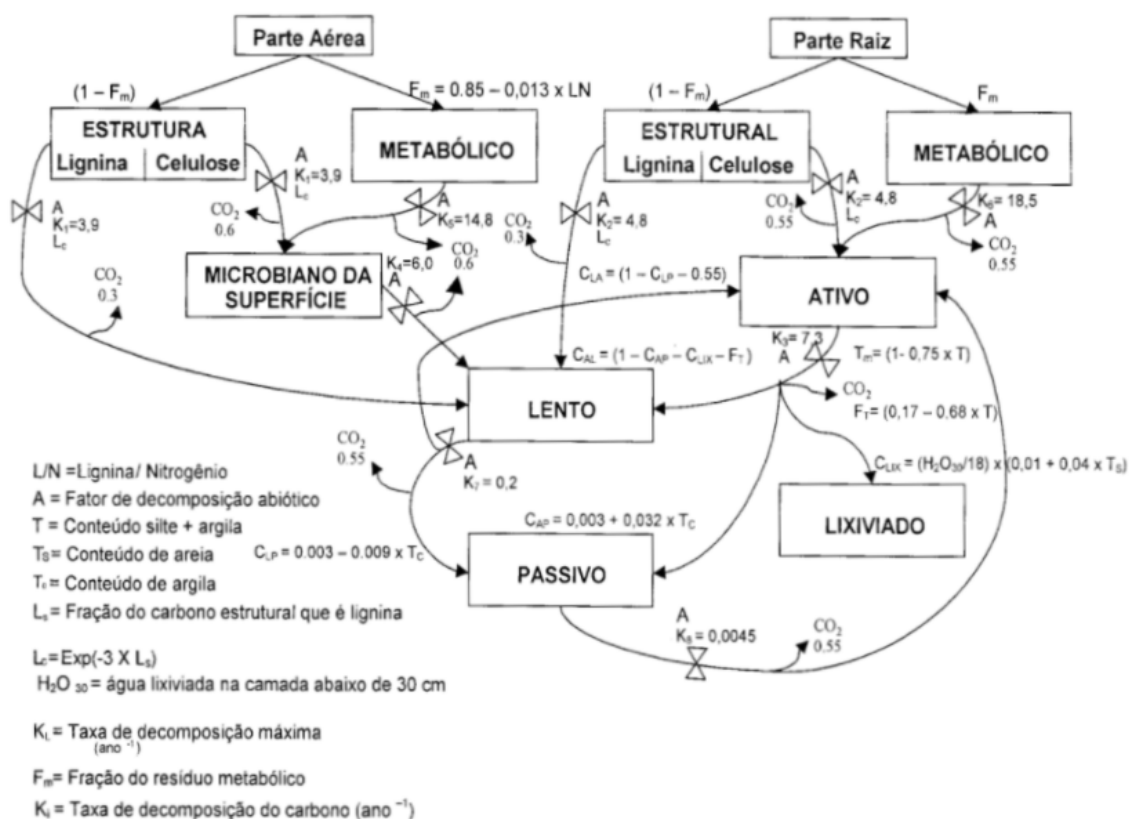
A previsão do comportamento da dinâmica de carbono no solo e dos aportes de carbono provenientes da produção agrícola é desafiadora, mas fundamental no contexto das mudanças climáticas. Modelos computacionais baseados em processos, também denominados mecanicistas, como o Century podem ser desenvolvidos com fins preditivos a partir de estudos científicos para



prever a dinâmica do carbono no solo e ser usado em conjunto com procedimentos de monitoramento para obter informações que possam ser usadas com diversos fins, desde testes de hipóteses científicas até o apoio ao mercado de carbono. O trabalho em tela se insere nesse contexto, com o foco na implementação do modelo Century em uma linguagem de programação moderna e que facilita o uso de diversos algoritmos para solução numérica de equações diferenciais, calibração, otimização e assimilação de dados.

## 2. MATERIAL E MÉTODOS

Como explicado por Leite e Mendonça (2003), o modelo Century, implementado originalmente em Fortran, recebe dados climáticos anuais, dados da composição do solo e dados da vegetação do local a ser simulado.; O modelo particiona a matéria orgânica do solo em três estoques de acordo com suas taxas de decomposição e consequentes tempos de permanência . Pela diferença nas taxas de decomposição, os estoques são denominados ativo, lento e passivo (Figura 1). Uma série de equações diferenciais são utilizadas para calcular os fluxos mensais entre cada um desses estoques, além de medir o fluxo de entrada de matéria orgânica proveniente da vegetação do local e da saída por meio de lixiviação e produção de CO<sub>2</sub> (Figura 1). O Century gera como saída as trajetórias (séries temporais) dos estoques de carbono e seus fluxos



**Figura 1.** Diagrama de Forreter mostrando os estoques e fluxos de carbono do modelo Century. Fonte: Leite e Mendonça (2003).

Para um entendimento mais aprofundado do funcionamento do modelo, participou-se do curso "Century: Modelagem da dinâmica da Matéria Orgânica do Solo", que foi uma capacitação interna oferecida pelo laboratório da Embrapa Informática Agropecuária, em que se estudou um pouco da teoria por trás do modelo e praticou-se o seu uso para diversos conjuntos de dados.

Além disso, participou-se da capacitação interna "System Dynamics com o sdSim" do mesmo laboratório. O sdSim é um pacote para a linguagem R desenvolvido pela Embrapa que facilita o desenvolvimento de modelos computacionais para sistemas dinâmicos e o objetivo da capacitação foi introduzir o pacote e exemplificar o seu uso, sendo isso pertinente a este projeto, pois pode-se utilizá-lo na implementação do modelo Century em R (BAZZANO et al., 2017).

Após os estudos acerca do funcionamento do modelo Century, iniciou-se o desenvolvimento de uma adaptação do seu código fonte na linguagem de programação R, com o intuito de modernizá-lo e deixá-lo mais fácil de expandir. Os scripts em R usam o pacote deSolve



(SOETAERT; PETZOLDT; SETZER, 2010) do R para a solução das equações diferenciais e geração das trajetórias dos estoques de Carbono do Century.

O script conta com um conjunto de funções que inicialmente lêem arquivos no formato padrão do Century original e carregam essas informações em vetores de parâmetros e variáveis de entrada mantidos em memória pelo R. De forma similar, configurações da simulação (e.g. duração e o passo de tempo) e eventos agendados são definidos (e.g. preparo de solo, plantio, colheita) são definidos.

Os vetores de parâmetros, estados e variáveis, são passados como argumentos para a função ODE do pacote deSolve juntamente com uma função que calcula as diferenciais dos estoques. Essa função passa os valores dos parâmetros e os estados atuais para uma série de funções auxiliares que retornam os valores dos fluxos de carbono, que são então utilizados para o cálculo das diferenciais de cada estoque. Essas diferenciais são retornadas para a função ODE, que as usa para atualizar os estoques utilizando o método de integração numérica selecionado pelo usuário.

Mais especificamente, as funções auxiliares definem uma matriz de transição de estado na qual cada linha e cada coluna define um estoque. Cada elemento da matriz, por sua vez, define a proporção do fluxo entre o estoque da linha correspondente para o estoque da coluna correspondente. Uma multiplicação matricial entre essa matriz de transição e o vetor de estados (estoques de carbono) resulta no vetor de diferenciais para cada estado. A utilização de álgebra matricial na transição de estado acelera a execução do código, já que a linguagem R é otimizada internamente para esse tipo de operação.

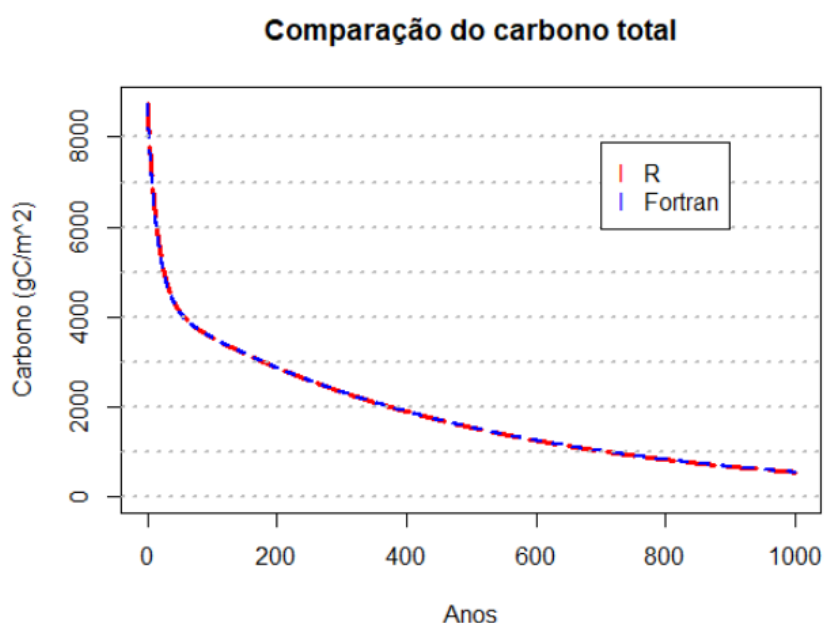
Com o vetor de estoques atualizado, inicia-se um novo passo de tempo, onde as funções auxiliares são calculadas novamente. Isso é repetido para cada passo de tempo definido no início da execução. Após a execução, a função ODE retorna um objeto derivado da classe data.frame do R com as séries temporais para cada estoque de carbono definido. Com isso, pode-se comparar os resultados obtidos pela adaptação em R aos resultados do modelo original em Fortran.

A implementação em R também modela a quantidade de água presente nas camadas do solo e a quantidade de Nitrogênio presente no solo, usando funções auxiliares adicionais que também são chamadas pelo deSolve a cada passo de tempo.

O código produzido está disponível em um repositório online do Github, no endereço <https://github.com/JBortolucci/Century.git>

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram comparadas as saídas do modelo de carbono Century implementado em R com os valores do modelo original implementado em Fortran. A Figura 2 ilustra as trajetórias do carbono total simulado por 1000 anos geradas pela implementação em R e pela implementação original em Fortran. Como pode-se ver, o resultado produzido é muito similar para os dois modelos, sendo até difícil diferenciar as linhas do gráfico.



**Figura 2.** Trajetórias do carbono orgânico total do solo obtidas pelas implementações do Century em R e em Fortran.

A Figura 3 representa uma função do modelo original que é chamada várias vezes a cada passo de tempo, com suas chamadas espalhadas em diversos arquivos. O seu objetivo é registrar todos os fluxos do passo de tempo em uma pilha da linguagem C para, ao fim do passo de tempo, aplicar uma equação de diferenças que será usada para atualizar o estado. A Figura 4 representa a função em R que tem o mesmo objetivo, mas é chamada apenas uma vez a cada passo de tempo. Como pode-se ver, a quantidade de linhas de código e chamadas de funções foi significativamente reduzida, deixando assim o código mais compreensível e fácil de ser estudado e alterado.



```
call csched(cfsfs2,som1ci(SRFC,LABELD),som1c(SRFC),
$          som1ci(SRFC,UNLABL),som2ci(UNLABL),
$          som1ci(SRFC,LABELD),som2ci(LABELD),
$          1.0,accum)
```

**Figura 3.** Trecho de código em Fortran que tem a função que atualiza os estados do carbono. Todo passo de tempo, esta função deve ser chamada uma vez para cada fluxo a ser modelado.

```
century.diff <- function(t, st, par, inp) {
  aux <- Aux(...) #Funções auxiliares para o carbono
  #Multiplicação matricial que define as diferenciais do
  carbono
  dC <- t(stC) %*% aux$A + aux$c

  auxN <- AuxN(...) #Funções auxiliares para o nitrogênio
  dN <- unlist(auxN$N.flow) #Diferenciais do nitrogênio

  return(list(c(dC, dN))) #Retorno das diferenciais para
o deSolve
}
```

**Figura 4.** Trecho de código em R que tem a função de atualizar os estados do carbono. Esta função é chamada pelo método numérico.

A modelagem de nitrogênio também foi implementada ao longo desse mesmo tempo, mas os resultados obtidos foram discrepantes com o modelo original em Fortran, o que indica que a implementação em R desse submodelo precisa ser corrigida.

#### 4. CONCLUSÃO

A implementação da parte principal do modelo Century, o modelo de dinâmica de carbono no solo, ocorreu com sucesso. O submodelo de nitrogênio também foi implementado, mas os seus resultados estão discrepantes com o modelo original, portanto ele ainda precisa de correções antes de poder ser utilizado em substituição ao original. Os submodelos de fósforo e de enxofre serão implementados em trabalhos futuros.

O código produzido em R é útil como uma modernização do modelo de carbono e pode ser utilizado para analisar a dinâmica do carbono no solo e, por ser mais compacto e legível é mais fácil de adaptar a casos específicos do que a implementação original. Além disso a implementação do algoritmo em R facilita o acoplamento do modelo e a aplicação de diversos algoritmos disponíveis em pacotes disponível para o R.





## Agradecimentos

Agradeço ao CNPq por financiar o projeto e à Embrapa por promovê-lo.

## 2. REFERÊNCIAS

BARIONI, L. G.; MANCINI, A. L. **Desenvolvimento de simuladores na agropecuária**. In: MASSRUHÁ, S. M. F. S.; LEITE, M. A. de A.; LUCHIARI JUNIOR, A.; ROMANI, L. A. S. (Ed.). *Tecnologias da informação e comunicação e suas relações com a agricultura*. Brasília, DF: Embrapa, 2014. Cap. 13. p. 259-271. Disponível em: <<https://www.alice.cnptia.embrapa.br/alice/bitstream/doc/1010756/1/capitulo1310714.pdf>>. Acesso em: 8 jul. 2021.

BAZZANO, C. F.; PEREIRA, B. H.; BARIONI, L. G.; MANCINI, A. L.; NICOLAU, M. sdSim: um pacote para modelagem e simulação de sistemas dinâmicos contínuos em R. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE AGROINFORMÁTICA, 11., 2017, Campinas. **Ciência de dados na era da agricultura digital: anais**. Campinas: Editora da Unicamp: Embrapa Informática Agropecuária, 2017, p. 217-226, SBIAgro 2017. Disponível em: <<https://www.alice.cnptia.embrapa.br/alice/bitstream/doc/1083366/1/sdsimSBIAgro.pdf>>. Acesso em: 8 jul. 2021.

LEITE, L. F. C.; MENDONÇA, E. de S. Century model of soil organic matter dynamics: equations and assumptions. **Ciência Rural**, v. 33, n. 4, p. 679-686, jul./ago. 2003. DOI: [10.1590/S0103-84782003000400015](https://doi.org/10.1590/S0103-84782003000400015).

SOETAERT, K.; PETZOLDT, T.; SETZER, R. W. Solving differential equations in R: package deSolve. **Journal of Statistical Software**, v. 33, n. 9, p. 1–25, 2010. DOI: [10.18637/jss.v033.i09](https://doi.org/10.18637/jss.v033.i09).

STOCKMANN, U.; ADAMS, M. A.; CRAWFORD, J. W.; FIELD, D. J.; HENAKAARCHCHI, N.; JENKINS, M.; MINASNY, B.; MCBRATNEY, A. B.; COURCELLES, V. de R. de; SINGH, K.; WHEELER, I.; ABBOTT, L.; ANGERS, D. A.; BALDOCK, J.; BIRD, M.; BROOKES, P. C.; CHENU, C.; JASTROW, J. D.; LAL, R.; LEHMANN, J.; O'DONNELL, A. G.; PARTON, W. J.; WHITEHEAD, D.; ZIMMERMANN, M. The knowns, known unknowns and unknowns of sequestration of soil organic carbon. **Agriculture Ecosystems & Environment**, v. 164, p. 80-89, Jan. 2013. DOI: [10.1016/j.agee.2012.10.001](https://doi.org/10.1016/j.agee.2012.10.001).