

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM SUSTENTABILIDADE NA GESTÃO
AMBIENTAL

Pierre Ferreira do Prado

**Calibração e validação operacional do acoplamento de softwares: Knearest,
Rosetta e APSIM para estimar fluxos de N₂O em plantações de cana-de-açúcar no
Brasil**

Sorocaba, SP

2013

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM SUSTENTABILIDADE NA GESTÃO
AMBIENTAL

Pierre Ferreira do Prado

**Calibração e validação operacional do acoplamento de softwares: Knearest,
Rosetta e APSIM para estimar fluxos de N₂O em plantações de cana-de-açúcar no
Brasil**

Dissertação apresentada ao Programa
de pós-graduação para obtenção do
título de mestre em Ciências
Ambientais

Orientadora: Profa. Dra. Janaina Braga do Carmo

Sorocaba, SP
2013

Prado, Pierre Ferreira do.
P896c Calibração e validação operacional do acoplamento de softwares:
Knearest, Rosetta e APSIM para estimar fluxos de N₂O em plantações de
cana-de-açúcar no Brasil. / Pierre Ferreira do Prado. -- Sorocaba, 2013.
37f. : 28 cm

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de São Carlos, *Campus*
Sorocaba, 2013
Orientador: Janaina Braga do Carmo

Banca examinadora: Marcelo Valadares Galdos, Fabio Vale
Scarpate
Bibliografia

1. Biocombustíveis. 2. Cana-de-açúcar - cultivo. 3. Efeito estufa. I. Título.
II. Sorocaba - Universidade Federal de São Carlos.

CDD 662.88

Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca do *Campus* de Sorocaba.

PIERRE FERREIRA DO PRADO

**ACOPLAMENTO DO KNEAREST, ROSETTA E APSIM PARA
ESTIMULAR FLUXOS DE N₂O EM PLANTAÇÕES DE CANA-
DE-AÇÚCAR NO BRASIL**

Dissertação apresentada no Programa de Pós-Graduação em Sustentabilidade na Gestão Ambiental do Centro de Ciências e Tecnologias para a Sustentabilidade da Universidade Federal de São Carlos para obtenção do título de Mestre em Sustentabilidade na Gestão ambiental, Área de Concentração: Sustentabilidade, Ambiente e Sociedade.

Sorocaba, 14 de junho de 2013

Orientador (a):



Prof. (a). Dr. (a). Janaina Braga do Carmo
Departamento de Ciências Ambientais da UFSCar Sorocaba

Examinadores (as):



Prof. (a). Dr. (a). Marcelo V. Galdos
Lab. Nac. Ciência e Tecnologia do Biotanol



Dr. (a). Fábio V. Scarpere
Lab. Nac. Ciência e Tecnologia do Biotanol

Agradecimentos

À Profa. Dra Janaina Braga do Carmo pela orientação, ensinamentos e dedicação.

Ao Dr. Peter Thorburn pelo apoio e ensinamentos.

Aos cidadãos conscientes que trabalham na rede pública de ensino na qual recebi toda a minha formação acadêmica.

A Capes pela bolsa de estudos concedida e a FAPESP pelo financiamento dos experimentos de campo que foram essenciais para execução deste trabalho.

Ao Programa de pós-graduação em Sustentabilidade na Gestão Ambiental e a todas as pessoas que trabalham para a realização do mesmo.

Aos meus familiares e amigos pelo incentivo ao longo deste trabalho.

Resumo

Este trabalho objetivou explorar a combinação dos softwares KNEAREST, ROSETTA e APSIM (KRAc) como ferramenta para o aumento de conhecimento sobre o fluxo de óxido nitroso emitido em plantações de cana-de-açúcar para a produção de etanol combustível entre outros produtos. Os dados utilizados foram provenientes de experimentos previamente publicados. Foram usados os valores das médias horárias (n=8) dos fluxos de óxido nitroso emitidos para atmosfera em três tratamentos diferentes na dosagem de palha, mantida após colheita, no solo de um canavial após primeiro corte: T1 (7 toneladas/ha), T2 (14 toneladas/ha), T3 (21 toneladas/ha) (blocos randômicos, fatorial 4x2 e sem aplicação de vinhaça). A pesquisa foi realizada em duas etapas: 1) seleção de parâmetro usando como referência dados coletados no tratamento T2, fertilização com nitrato de amônio na primeira soca da cana-de-açúcar; 2) o modelo combinado foi parametrizado para estimar o fluxo de óxido nitroso de dois outros tratamentos T1 (7 t de palha/ha, fertilização sintética com nitrato de amônio na primeira soca da cana-de-açúcar) e T3 (21 t de palha/ha, fertilização sintética com nitrato de amônio na primeira soca da cana-de-açúcar). O índice usado para sumarizar os resultados foi o erro quadrático médio (RMSE). O melhor ajuste aos dados medidos em campo versus valores observados ocorreu na simulação que usou coeficiente de desnitrificação de 0.0002 (RMSE máximo de 0,047 Kg N-N₂O/ha), consideravelmente menor que os valores relatados na literatura; simulações com este ajuste descreveram razoavelmente os dados dos outros tratamentos em questão. As comparações apresentadas indicaram o potencial do uso do acoplamento KRAc como uma ferramenta prática, que requer dados de baixo custo na entrada para prever emissões de óxido nitroso em plantação típica de cana-de-açúcar para subsidiar a análise de ciclo de vida do etanol combustível de primeira e segunda geração.

Palavras chaves: Fluxo de N₂O, biocombustíveis, desnitrificação, simulação, APSIM, cana-de-açúcar.

Abstract

This study aimed to explore the combination of software KNEAREST, ROSETTA and APSIM (KRAC) as a tool for increasing knowledge about the flow of nitrous oxide issued in plantations of sugar cane for the production of fuel ethanol and other products. The data used were from previously published experiments. Were used the values of the hourly averages ($n = 8$) flows of nitrous oxide emitted to the atmosphere in three different treatments at a dosage of straw remains after harvesting, soil from a plantation after first cut: T1 (7 tons / ha), T2 (14 tons / ha), T3 (21 tons / ha) (randomized blocks, factorial 4x2 and without application of vinasse). The research was conducted in two stages: 1) parameter selection using reference data collected in treatment T2, fertilization with ammonium nitrate in the first ratoon cane sugar, 2) the combined model was parameterized and used to estimate the Nitrous oxide flow two other treatments T1 (7 t straw / ha, synthetic fertilizer and ammonium nitrate in the first ratoon cane sugar) and T3 (21 t straw / ha, synthetic fertilizer and ammonium nitrate in the second leaf of cane sugar). The index used to summarize the results was the root of mean squared error (RMSE). The best fit to the data measured in the field versus observed values occurred in the simulation that used denitrification coefficient of 0.0002 (RMSE maximum of 0, 047 kg N-N₂O/ha), considerably lower than the values reported in the literature; simulations with this adjustment described reasonably data from other treatments in question. The comparisons indicated the potential use of the coupling KRAC as a practical tool that requires low cost data entry in order to predict nitrous oxide emissions in typical plantation of cane sugar to help the analysis of the life cycle of ethanol fuel first and second generation.

Keywords: N₂O flux, ethanol, denitrification, simulation, APSIM , sugar cane, biofuel

SUMÁRIO

1. Introdução e revisão bibliográfica	01
2. Objetivos	13
3. Material e Métodos	13
3.1 Dados Experimentais	13
3.2 Simulações no APSIM	16
3.3 Parâmetros de entrada comum a todas as simulações	17
3.3.1 Módulo Sugar Cane	19
3.3.2 SoilN	19
3.3.3 SoilWat	20
3.3.4 Módulo surface OM	21
3.4 Calibração da denitrificação	22
4. Resultados	23
5. Discussão	27
6. Conclusões	30
7. Referências Bibliográficas	30

Lista de figuras

Figura 1. Azul – ambiente aeróbio – Nitrificação (passo I) – oxidação da amônia; preto – ambiente aeróbio – Nitrificação (passo II) – oxidação do nitrito; laranja – ambiente facultativo – Denitrificação nitrificante; verde – ambiente facultativo – Químio-denitrificação; vermelho – ambiente anaeróbio – denitrificação. (VENTEREA et al., 2012). **04**

Figura 2. Transformações do ciclo do nitrogênio e balanço de troca de prótons (+ ganho- perda). Fonte: (FARQUHARSON ,BALDOCK, 2008). **09**

Figura 3. Diagrama esquemático das simulações baseadas em APSIM e respectivas conexões de módulos. Fonte:(APSIM, 2012). **11**

Figura 4. Precipitação mensal e temperatura média na área experimental no período de novembro de 2010 a novembro de 2011. Fonte: (ZOTELLI, 2012). **14**

Figura 5 – Câmara de coleta de gases com seringa e frascos vedados utilizados. Adaptado de Zotelli (2012).

Figura 6. Estrutura de diretórios da simulação. **16**

Figura 7. Diagrama Esquemático da abordagem de acoplamento: KRAC.1 Knearest, 2-Rosetta, 3 – APSIM. **18**

Figura 8. Comparação entre valores medidos e estimados para o tratamento T2 usando $K_{denit}=0.0002$. **21**

Figura 9. Comparação entre valores medidos e estimados para o tratamento T2 usando $K_{denit}=0.001379$. **23**

Figura 10. Comparação entre valores medidos e estimados para o **24** tratamento T2 usando $K_{denit}=0.0006$.

Figura 11. Comparação entre valores medidos e estimados para o **25** tratamento T1 usando $K_{denit}=0.0002$ (T1-P3).

Figura 12. Comparação entre valores medidos e estimados para o **27** tratamento T3 usando $K_{denit}=0.0002$ (T3-P3).

Lista de tabelas

Tabela 1- Modelos simplificados: tabela adaptada (HEINEN, 2006).	08
Tabela 2. Características do solo 1	13
Tabela 3. Detalhes de fertilização adaptado de (ZOTELLI, 2012)	15
Tabela 4. Cronologia dos eventos na simulação	17
Tabela 5. Dias das coletas utilizadas como referência	17
Tabela 6. Caracterização do solo medidos por Laclau et al . Adaptado de (BATTIE LACLAU ,LACLAU, 2009)	18
Tabela 7. Nitrogênio inicial	20
Tabela 8. Detalhamento das simulações e parâmetros utilizados	22

Lista de abreviações

IAA	Instituto do Açúcar e do Alcool
GEE	Gases de efeito estufa
PROALCOOL	Programa Nacional do Alcool
k-NN	Nearest Neighbour
APSIM	Agricultural Production Systems Simulator
EUA	Estados Unidos da América
USDA	Departamento de agricultura do EUA
KRAc	Acoplamento de softwares: Knearest, Rosetta e APSIM
CTC	Centro de tecnologia canavieira
RMSE	Root mean squared error (raiz do erro quadrático médio)
UM	United Nations (Organização da nações unidas)
FAO	Food and Agricultural Organization (Organização para tratar de agricultura e alimentos)
Kdenit	Constante de denitrificação do módulo SOILN
DUL	Drained upper limit (capacidade de campo do solo)
LL	Lower Limit (ponto murcha permanente)
SAT	Saturação de água no solo
N-n	Nitrogênio contido na forma da substância n
Tn-Pn	Tratamento número n – Parâmetro usado: n
SWCON	Parâmetro de condutividade hidráulica do módulo SoilN do APSIM

1. Introdução e revisão bibliográfica

A crescente discussão internacional sobre o aquecimento global e o papel das energias renováveis, faz com que se retome a questão do uso dos biocombustíveis. A produção do etanol no Brasil tem sido foco destas discussões, em função de sua capacidade de produção e o histórico de mais de três décadas na implementação de um programa nacional de produção de etanol para a indústria automobilística.

Do ponto de vista internacional, inclusive alinhado aos princípios do Protocolo de Quioto, acordos vêm sendo discutidos visando ampliar a participação dos biocombustíveis nas matrizes energéticas nacionais, principalmente, no contexto dos países industrializados.

A produção do açúcar no Brasil a partir da cana-de-açúcar data do período colonial (1520) e foi o primeiro grande produto de exportação brasileiro. Ao final do século XIX a produção estava sob forte pressão da concorrência internacional e precisava ser urgentemente modernizada (MORAES, 2007).

Em 1920 a situação de vulnerabilidade da agroindústria brasileira foi acentuada o que induziu a primeira intervenção estatal com a criação do Instituto do Açúcar e do Alcool (IAA) em 1933. Os produtores pediam ações para a solução do problema de excesso de oferta no mercado. Este setor tem sido marcado desde então pela forte intervenção estatal na venda e regulação de cotas de produção. Esta intervenção foi marcada mais recentemente pela criação do PROALCOOL que lançou o Brasil ao posto de pioneiro no desenvolvimento da produção e aplicação em larga escala do uso do etanol líquido derivado da cana-de-açúcar como combustível de alta eficiência e baixo custo (MORAES, 2007).

Os biocombustíveis têm sido fonte de energia desde os tempos mais remotos (DEMIRBAS et al., 2006). O interesse atual nestes se deve entre outras à probabilidade de, devido ao seu uso, diminuir-se emissões de gases do efeito estufa. A construção de políticas para a bioenergia devem ser orientadas por (UN-ENERGY, 2004):

- 1) Proteção dos pequenos produtores em relação a perdas de terras para produtores em larga escala;
- 2) Respeito e proteção dos direitos de propriedade;
- 3) Ampla consulta dos grupos de interesse quando aos tipos de uso do solo;

- 4) Avaliação dos impactos ambientais;
- 5) Monitoramento e redução de emissões;
- 6) Proteção da biodiversidade;;
- 7) Manutenção da produtividade do solo
- 8) Identificação e fomento de pesquisas necessárias para implementação de políticas públicas para a bioenergia;
- 9) Integração das políticas públicas.

O item 5, previamente citado, demonstra que o monitoramento e a redução de emissões dos gases do efeito estufa, entre eles óxido nitroso é, portanto, considerado um aspecto fundamental a ser avaliado. Para tanto, se faz necessárias estimativas de emissões para toda a área de produção de etanol no Brasil, que são informações fundamentais e que devem ser permanentemente revistas e tornadas mais precisas como parte integrante de um processo de melhora contínua.

Observa-se que esforços do estado brasileiro e do setor produtivo vêm sendo empregados no estabelecimento de mercados para exportação do etanol para países da América, Europa e Ásia. Desta forma, já se tem observado um crescente deslocamento de investimentos nacionais e internacionais neste setor, com ampliação de áreas de plantação de cana-de-açúcar e de usinas de produção, acompanhados também por crescimento da demanda de equipamentos e infra-estruturas relacionados, em nosso território e, em especial, no estado de São Paulo (MACEDO, 2004).

Há, no entanto, uma inquietação significativa de parcela da sociedade brasileira, como também da sociedade internacional, potencial consumidora do etanol brasileiro, sobre um balanço dos impactos oriundos do atual padrão de cultivo da cana-de-açúcar e produção do etanol, principalmente, no que tange à emissão de gases do efeito estufa no ciclo de vida deste combustível. A necessidade de preenchimentos de lacunas científicas nesta área foi acentuada devido à pesquisa que indicou que as atuais práticas agrícolas relativas à cana-de-açúcar proporcionam uma emissão intensiva de óxido nitroso, ocasionando dúvidas quanto a sustentabilidade de uso de etanol (CRUTZEN et al., 2008). Somado a este indício existe a constatação de que há poucos monitoramentos destas emissões, significativa parcela dos monitoramentos que existem, foram concentrados na Austrália (THORBURN et al., 2010).

A prevista expansão do plantio, que já ocupa grande parte dos campos agrícolas paulistas, sobre áreas de baixa produtividade, exigirá intensificação da adubação

nitrogenada e, por conseqüência, a elevação do potencial de emissões de óxido nitroso, um potente gás do efeito estufa, resultante dos complexos processos que ocorrem no solo (CARMO et al., 2005; CARMO et al., 2007; MAGGI, 2008; SNYDER et al., 2009).

Em um momento histórico, em que o aumento da compreensão, com enfoque sistêmico, desta dinâmica complexa dos fatores ambientais, sociais e econômicos associados ao sistema de plantio da cana-de-açúcar e produção do etanol é crucial para orientar processos de tomada de decisão nos diversos âmbitos de governo, empresas e sociedade civil. A utilização e aperfeiçoamento de ferramentas computacionais que permitam estimativas de emissões de óxido nitroso tornam-se uma possibilidade a ser explorada, como componente deste requerido aparato de avaliação da sustentabilidade do etanol combustível produzido no Brasil, considerando-se a mudança da matriz energética como um meio de controle do efeito estufa e a mudança rumo a uma sociedade sustentável.

A extrapolação geográfica, na estimativa das emissões de óxido nitroso, é uma tarefa complexa dadas a variabilidades inerentes ao processo. Este fato é um indicio coerente com a constatação de que a complexidade constitui a principal barreira para implementação de sistemas energéticos renováveis entre eles os biocombustíveis (BUCHHOLZ et al., 2009). Questões como estas podem ser tratadas com métodos matemáticos e computacionais dadas a necessidade de aquisição e manipulação de grande volume (alta variabilidade espacial) de informação em intervalos de tempo relativamente restritos dentro do arcabouço da viabilidade econômica (DEL GROSSO et al., 2005; MAGGI, 2008; GILTRAP et al., 2010), como verificou-se em pesquisa conduzida na Austrália (THORBURN et al., 2010).

No entanto, modelos matemáticos devem ser adaptados a partir de dados e formulações que representem as especificidades dos cultivares em questão, para que produzam informações úteis e não induzam extrapolações inadequadas (HEINEN, 2006). Dessa forma, o acoplamento (previamente planejado a partir de experiências anteriores) de experimentos de monitoramento de longa duração (ciclo completo da cultura), de monitoramento de emissões de óxido nitroso em condições brasileiras, fornece subsídios para que o uso de modelos matemáticos permita estimar, na escala do somatório das áreas plantadas as emissões de óxido nitroso de forma adequada às condições brasileiras ; resultando então em potencial a ser explorado para subsidiar as informações necessárias às decisões estratégicas (no âmbito de inventários de Gases de

Efeito Estufa – GEE da produção de etanol) demandadas na consolidação do etanol na matriz energética brasileira e mundial.

O cultivo de cana-de-açúcar o qual tem grande relevância nas regiões tropicais e subtropicais, usualmente exige uma fertilização com grande quantidade de nitrogênio, que na ocorrência de elevada temperatura e umidade comuns nestas localidades, conduzem a um grande potencial de emissão de óxido nitroso nos solos em questão (THORBURN et al., 2010).

A geração do óxido nitroso no solo pode ocorrer no mínimo por quatro processos diferentes o que torna a sua minimização uma tarefa complexa. Um diagrama explicativo de rotas relacionadas à produção de óxido nitroso no solo pode ser observado na Figura 1.

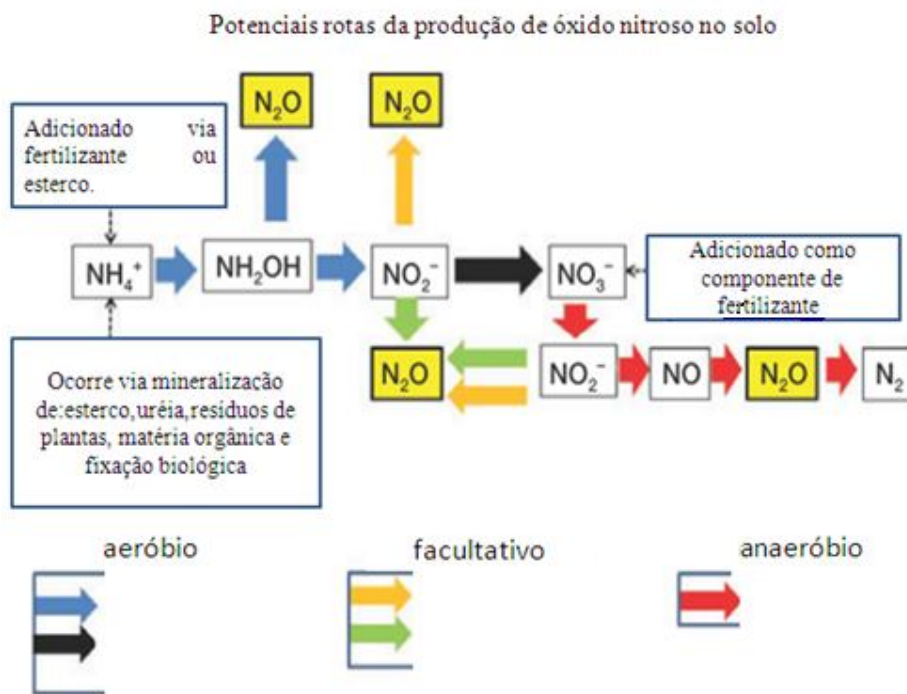


Figura 1. Azul – ambiente aeróbico – Nitrificação (passo I) – oxidação da amônia; preto – ambiente aeróbico – Nitrificação (passo II) – oxidação do nitrito; laranja – ambiente facultativo – Denitrificação nitrificante; verde – ambiente facultativo – Quimiodenitrificação; vermelho – ambiente anaeróbico – denitrificação. Adaptado de (VENTEREA et al., 2012).

A nitrificação é primariamente conduzida por bactérias autotróficas em ambos os passos: 1 e 2. A denitrificação é promovida por bactérias e fungos heterotróficos. Parte da amina produzida na nitrificação pode ser convertida quimicamente a óxido nitroso; o nitrito também pode quimicamente ser transformado em óxido nitroso, geralmente, em ambientes ácidos, no processo denominado quimio-denitrificação (VENTEREA et al., 2012).

O óxido nitroso é considerado um potente gás de efeito estufa (GEE): tem potencial 296 vezes superior em relação ao potencial referencial do gás carbônico (CRUTZEN et al., 2008), também é associado à depleção da camada de ozônio (PORTMANN et al., 2012). A minimização dos impactos ambientais relacionados às emissões agrícolas de N_2O é um assunto complexo e prioritário nas discussões da segurança alimentar e matriz energética no âmbito das mudanças climáticas (UN-ENERGY, 2004); este tem sido tratado com diversos enfoques como: ciclo de vida do etanol combustível, gestão de fertilizantes e outros (CRUTZEN et al., 2008; SNYDER et al., 2009; THORBURN et al., 2010; ZANATTA et al.; RENOUF et al., 2010; CARMO et al., 2011).

As emissões de N_2O em campos agrícolas são, em grande parte, relacionadas ao processo microbiológico denominado desnitrificação ou denitrificação heterotrófica. Este processo é controlado pela temperatura do solo, concentração de nitrato, umidade do solo, disponibilidade de oxigênio, textura e microbiota (LAUDONE et al., 2011). O nitrito é considerado molécula chave por ser precursora das emissões de N_2O , no entanto, o conhecimento sobre o aumento de sua concentração no solo e as equações que governam a transformação deste em N_2O é considerado limitado (VENTEREA et al., 2012).

Clima e tipo do solo são os elementos principais na emissão de óxido nitroso, porém práticas atuais parecem rudimentares diante das tecnologias disponíveis a serem aplicadas como: sensores, posicionamento global, tecnologia aplicável à entrega de fertilizante, capacidade de processamento de dados e mapeamento dos campos agrícolas, mas, estas exigem uma adequação quanto ao custo e praticidade de aplicação (VENTEREA et al., 2012).

Foi relatado que mudanças de gerenciamento alteraram parâmetros relacionados às emissões de N_2O , como por exemplo: a colheita sem uso de fogo e a manutenção da palha no campo ocasionaram, em um cultivo típico, a diminuição da temperatura média

do solo em 7°C e a redução da produtividade (número de colmos e massa úmida) (TIMM, 2002).

Observou-se que a cobertura vegetal interferiu na evapotranspiração apenas durante os 90 dias iniciais do experimento (TIMM, 2002). A medida que a profundidade aumenta a cobertura vegetal tem sua relevância diminuída em relação a umidade da camada em questão e altera a ordem de importância da perda superficial para a percolação profunda, no que se relaciona ao balanço hídrico (PERES et al., 2010). Muitos modelos simplificados de desnitrificação estabelecem uma proporção direta entre o conteúdo de água do solo e a disponibilidade de oxigênio, que é considerado o fator fundamental neste processo (HEINEN, 2006). A manutenção da palha simulada e medida, após a reforma do canavial, interferiu também positivamente no aumento da matéria orgânica do solo (GALDOS et al., 2009).

O Brasil e os Estados Unidos da América são os únicos países que produzem etanol combustível a partir da cana-de-açúcar em larga escala, com mais de 30 anos de experiência. O Brasil é considerado um ator global neste mercado. Este consagrado sistema produtivo é um exemplo que poderia ser replicado em muitos outros países. (GOLDEMBERG, 2007). Como resultado da grande escala produtiva e de exportação, o sistema produtivo brasileiro vem sendo intensamente avaliado quanto à sustentabilidade, incluindo o que se refere às emissões de gases do efeito estufa (CORBIÈRE-NICOLLIER et al., 2011; AZADI et al., 2012).

O modelo matemático de um processo ecológico consiste em uma formulação matemática com cinco componentes (JORGENSEN, VOLLENWEIDER, 2000):

“1) funções de força ou variáveis externas: são aquelas que influenciam as condições do ecossistema;

2) variáveis de estado: são aquelas que descrevem o estado do ecossistema.

3) equações: representam as relações entre as funções de força e as variáveis de estado e, por conseguinte os modelos apresentam aptidão para:

- a) Auxiliar na fiscalização de sistemas complexos;*
- b) Revelar propriedades do sistema;*
- c) Explicitar deficiências no conhecimento;*
- d) Testar hipóteses científicas nas comparações entre o observado o valor simulado;*

- 4) *Parâmetros: constantes específicas de um ecossistema ou de parte dele. São objeto de calibração que é o processo de seleção dos parâmetros para que ocorra o melhor ajuste entre as variáveis de estado computadas e as medidas. Na calibração pode se inserir a influência de processos não considerados na modelagem que apresentam influência, ainda que menor, nas variáveis de estado reais;*
- 5) *Constantes: valores fixos que não são objetos de calibração. O processo de testar a lógica interna do modelo é chamada verificação e o teste objetivo de quão bem o modelo ajusta os dados de saída é denominado validação.”*

Em termos de software ou acoplamento de softwares, a comparação entre os valores simulados e medidos em campo é denominada validação operacional e normalmente é parte integrante de um projeto de coletas de evidências de que o software (ou acoplamento de softwares) atende aos propósitos especificados para a criação do mesmo e cumpre os objetivos estabelecidos para este (USA, 2002).

A abordagem de problemas via modelos matemáticos, entendidos como a tradução em linguagem matemática de um modelo (simplificação da realidade) teórico, potencialmente contribui para acelerar o domínio sobre uma questão científica e pode implicar na diminuição dos esforços com experimentos de campo (BERGAMASCO et al., 2002). O elemento computacional, geralmente presente, auxilia na automatização da aquisição e processamento de dados e nos cálculos. Como exemplo, esforços em modelagem vêm sendo feitos para pesquisas de propriedades hidráulicas do solo, notoriamente, com a proposição de funções de pedotransfêrencia (GREEN et al., 2003)

As ferramentas matemáticas e computacionais estão sendo também aplicadas na tarefa de entender as emissões de óxido nitroso induzidas pela fertilização (KHALIL et al., 2005; HEINEN, 2006; FARQUHARSON, BALDOCK, 2008; METAY, A. et al., 2010; THORBURN et al., 2010; GILTRAP et al., 2010). Dentre estas, os modelos baseados no processo (determinísticos – construídos em torno de equações para descrever o fenômeno), que em geral requerem qualidades hidráulicas do solo como entrada, são criticados quanto às considerações empíricas relacionadas à difusão de O_2 no solo (LAUDONE et al., 2011). Os modelos baseados em processos mostram potencial para prever os fluxos de N_2O , no entanto são necessários mais esforços em testes, refinamento e calibrações (GROSSO et al., 2012). Heinen (2006) fez uma

compilação de modelos simplificados de desnitrificação (Tabela 1) e no qual concluiu que não havia nenhum modelo geral simplificado que pudesse ser utilizado sem uma calibração específica para cada local em estudo.

Tabela 1- Modelos simplificados: tabela adaptada (HEINEN, 2006).

Nome do modelo	Autores
ADAPT	Desmond et al. (1995)
NCSOIL	Molina et al. (1983)
ANIMO	Groenendijk and Kroes (1999)
NCSWAP	Clay et al. (1985)
BAMO, BAMO2	Doring et al. (1993)
NEMIS	Henault and Germon (2000)
Boundary line model, 1	Bergstrom and Beauchamp (1993)
NGAS	Parton et al. (1996)
Boundary line model, 2	Elliott and de Jong (1993)
NICCOE	Van Dam and van Breemen (1995)
CANDY	Franko et al. (1995)
NITDEN	Conijn and Heinen (2001), Conijn (2002)
CERES	Godwin and Jones (1991)
NITS	Birkinshaw and Ewen (2000)
ib. in DSSAT	Godwin and Singh (1998)
Colbourn	Colbourn (1993)
NITWAT	McIssac et al. (1993)
COUPMODEL	Jansson and Karlberg (2001)
NLEAP, NLOS	Shaffer et al. (1991, 2001a), Xu et al. (1998), Bittman et al. (2001)
CREAMS	Knisel (1980) como divulgado por Marchetti et al. (1997)
NUCM	Sogn and Abrahamsen (1997)
CREAMS-NT	Deizman and Mostaghimi (1991)
NUCSAM	Kros (2002)
CRISP	Nielsen et al. (1999)
REMM	Inamdar et al. (1999)
CROPSYST	Stockle and Nelson (1995) divulgado por Marchetti
RENLEM	Kragt and de Vries (1989)
DAISY	Hansen et al. (1990, 1991)
RESAM	De Vries et al. (1988, 1994, 1995),
DAYCENT	Del Grosso et al. (2001), Parton et al. (2001)
SMART2	Kros (2002)
DRAINMOD-N	Breve et al. (1997)
SOILN	Johansson et al. (1987, 1991)
EPIC	Sharply and Williams (1990) como dado por Vold et al. (1999)
EXPERT-N	Priesack et al. (2001)
SONICG	Bril et al. (1994)
GLEAMS	Leonard et al. (1987) como divulgado por Marchetti et al.
STICS	Brisson et al. (2003)
Grundmann and Rolston	Grundmann and Rolston (1987)
STOTRASIM	Feichtinger (1996)
HERMES	Kersebaum (1995), Kersebaum and Beblík (2001)
SUNDIAL	Bradbury et al. (1993)
IMPACT	Andrews et al. (1997)
SWAP	Van Dam et al. (1997)
LASCAM-NP	Viney et al. (2000)
SWATNIT	Vereecken et al. (1990, 1991)
LEACHM	Wagenet and Hutson (1989) como divulgado por Ramos
SWMS_2D	Simunek et al. (1994) and Carbonell (1991)
LEACHMN	Sogbedi et al. (2001)
WANISIM	Antonopoulos and Wyseure (1998)
Lippold and Matzel	Lippold and Matzel (1992)
WASMOD	Reiche (1994, 1996)
MATHILD	Lafolie (1991), Lafolie et al. (1997)
WATROOM	Parsons et al. (1998)
MELEF	Morell et al. (1996)
WAVE	Vanclouster et al. (1996)
MINERVA	Kersebaum (1995), Kersebaum and Beblík (2001)
WHNSIM	Huwe (1993), Huwe and Totsche (1995)

Os modelos de predição de óxido nitroso e as respectivas transformações foram tratados em específico em trabalho sobre a mesma temática (FARQUHARSON ,BALDOCK, 2008) (Figura 2)

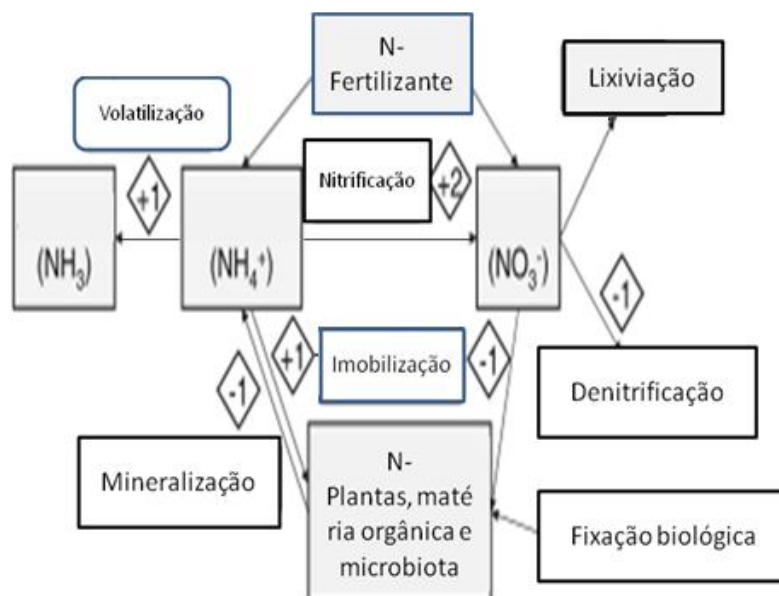


Figura 2. Transformações do ciclo do nitrogênio e balanço de troca de prótons (+ ganho-perda)

Fonte: adaptado de (FARQUHARSON ,BALDOCK, 2008)

Há registros no Brasil da aplicação de simuladores para a previsão de desenvolvimento da cultura (MARIN et al., 2008) e safra de canaviais (PEREIRA ,MACHADO, 1986; NASSIF et al., 2012) com resultados promissores no que se refere a utilidade desta abordagem.

Simulações computacionais foram também aplicadas em solo do cerrado brasileiro não cultivado com cana-de-açúcar para estimar o fluxo de óxido nitroso e apontou a necessidade de adaptações específicas para a adequação dos modelos utilizados (PAST+NOE) de acordo com especificidades dos trópicos (METAY, AURÉLIE et al., 2007) e também na simulação da dinâmica de nitrogênio em argissolos (BORTOLON et al., 2009), entre outros.

Enfatizando, um aspecto que favorece o uso destes modelos citados para a previsão de propriedades hidráulicas e previsão de fluxo de óxido nitroso em plantações

de cana-de-açúcar no Brasil, é ao grande variabilidade espacial na escala de milhares de quilômetros, que conjuntamente com a escassez de dados já medidos e os custos relacionados a estas medições, tornam as ferramentas computacionais atrativas.

Neste contexto emergem os softwares: K-Nearest, Rosetta e APSIM. K-Nearest (v1.00.01) é um software gratuito baseado no algoritmo de classificação de mesmo nome e que produz estimativas a retenção de água no solo nos potenciais mátricos de -33KPa e -1500KPa (NEMES et al., 2006). Este software foi desenvolvido pelo departamento de agricultura dos EUA (USDA) e empregado em estudos comparativos de performance com outras ferramentas (NEMES et al., 2009) entre outros estudos. Rosetta (v1.0) é um software gratuito que estima os parâmetros da equação de Van Genuchten, usando tabelas comparativas ou algoritmos baseados em redes neurais (SCHAAP et al., 2001). Este software tem sido aplicado em muitos trabalhos relacionados à predição da quantidade de água no solo (CHEN, PAYNE, 2001; SOMMER et al., 2003; SULEIMAN, RITCHIE, 2003; GÉRARD et al., 2004; MINASNY et al., 2004; SCHWEN et al., 2011). Apesar do relevante número de estudos com aplicação destes softwares na literatura internacional, na literatura brasileira a quantidade de estudos que utilizaram estas ferramentas é diminuta.

As redes neurais artificiais são métodos computacionais baseados no funcionamento do cérebro humano e apresentam a capacidade de aprendizado autônomo que pode ser usada na modelagem de problemas físicos complexos como comportamentos não lineares a partir das entradas e saídas conhecidas. A relação matemática, muitas vezes, é desconhecida ou muito complexa como, por exemplo, a utilização na predição da curva de retenção de água em solos a partir de dados facilmente medidos como textura, granulometria e densidade do solo (XIONG et al., 2011). Este método teve origem em 1943, no entanto, seu uso atingiu escala a partir de 1986 (MAIER, DANDY, 2000). No âmbito de condições brasileiras, em comparações entre valores medidos e estimados usando Rosetta, o ajuste matemático resultante foi considerado bom para a estimativa da condutividade hidráulica em condição não saturada em um latossolo do cerrado (DINIZ, 2012).

A metodologia k-NN(K-Nearest Neighbour) é baseada no reconhecimento de padrões e não no ajuste a equações explícitas. O processo é baseado na localização da informação armazenada que seja mais próxima as disponíveis em uma base de dados de entradas e saídas para então produzir a estimativa requerida. Apresenta flexibilidade no sentido que com o fornecimento de novas entradas e saídas pode-se aumentar o poder de

estimativa sem a necessidade de alterações em equações (NEMES et al., 2008). Esta alternativa às equações de pedotransferência (propostas a partir de regressões multilíneas) foi considerada competitiva enquanto alternativa para uso em estudos de solos tropicais (BOTULA et al., 2012). No Brasil esta técnica vem sendo explorada em reconhecimento de padrões de imagens e no campo da meteorologia (ALVES et al., 2007) entre outros, com resultados positivos.

O APSIM (Agricultural Production System Simulator; código aberto modificado) (Figura 3) é uma plataforma modular de modelação que foi desenvolvido para simular os aspectos agrícolas e ambientais de fazendas (MCCOWN *et al.*, 1995; MCCOWN *et al.*, 1996; KEATING *et al.*, 2003; HUTH *et al.*, 2010). A capacidade de fornecer como saída o fluxo diário de N₂O foi recentemente implementada no módulo SoilN (THORBURN *et al.*, 2010) centrado em um modelo matemático previamente proposto (DELGROSSO et al., 2000).

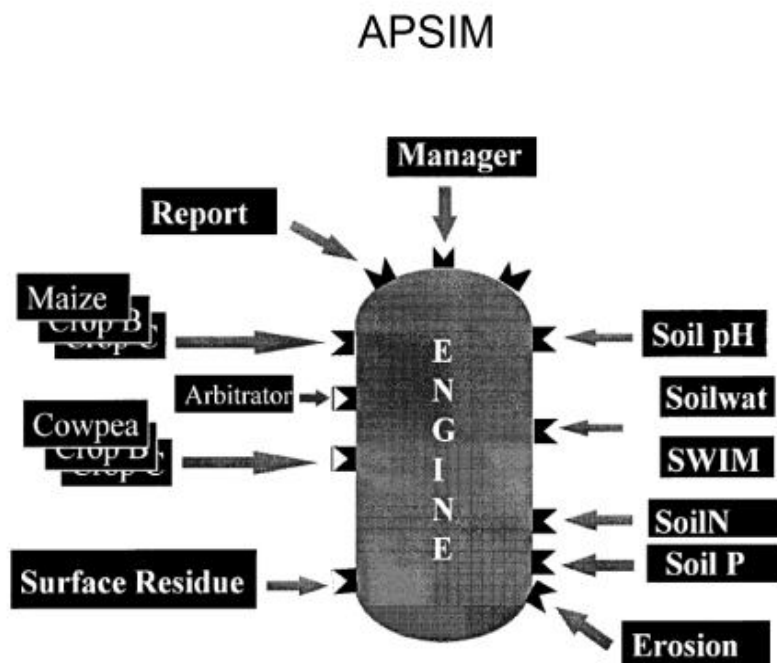


Figura 3. Diagrama esquemático das simulações baseadas em APSIM e respectivas conexões de módulos.

Fonte: adaptado de (APSIM, 2012)

Thorburn et al (2010) descreveram o uso do APSIM para simular emissões de N_2O em canaviais na Austrália. Em etapa preliminar os autores utilizaram rotinas de otimização para estimar alguns parâmetros. Para isto, simularam com diferentes conjuntos de parâmetros e compararam com medidas em campo por meio da análise do RMSE. Esta análise mostrou que apenas a constante de denitrificação K_{denit} (coeficiente de denitrificação) deveria ser alterada em relação ao valor padrão. Um valor de 0.001379 foi encontrado em contraste ao padrão de 0.0006. Este trabalho sugeriu também que o K_{denit} pode ser específico do local sob estudo. No trabalho desenvolvido por (HUTH et al., 2010) também descreveu a necessidade de alteração do K_{denit} para melhorar a capacidade de predição de emissão de óxido nitroso baseado em dados coletados em cultivo de legumes, ratificando a alteração proposta por Thorburn et al. (2010) na pesquisa desenvolvida por (XING et al., 2011) também concluíram que esta modificação sugerida é eficiente apesar de estabelecer que novos estudos devem ser feitos para avaliar os efeitos líquidos desta alteração para a calibração do modelo. Abaixo as equações que regem o modelo (como mostrado por (THORBURN et al., 2010) :

$$R_{denit,i} = k_{denit} \cdot NO_{3,i}^- \cdot C_{A,i} \cdot F_{moist,i} \cdot F_{temp,i}$$

$$C_{A,i} = 0.0031 SOC_{ppm,i} + 24,5$$

$$SOC_{ppm,i} = HUM_{C_{ppm,i}} + FOM_{C_{ppm,i}}$$

$$F_{moist,i} = \left[\frac{SW_i - DUL_i}{SAT_i - DUL_i} \right]^x$$

$$F_{temp,i} = 0.1 \exp(0.046 ST_i)$$

$$\frac{N_2}{N_2O_{denit}} = MAX \left[(0.16k_1), \left(k_1 \exp \left(\frac{-0.8NO_3 ppm}{CO_2} \right) \right) \right] \cdot MAX [0.1, ((1.5WFPS) - 0.32)]$$

$$N_2O_{nit} = k_2 R_{nit}$$

A produção científica conectando simulações em APSIM com dados medidos no Brasil é escassa, especialmente na predição de gases de efeito estufa em cultivos de cana-de-açúcar e respectivos parâmetros. Dentre os trabalhos que usaram APSIM em condições brasileiras há algumas publicações recentes relacionadas ao cultivo de arroz e a decomposição de resíduos. (LORENCONI et al., 2010; NASCIMENTO et al., 2011 ; STONE ,HEINEMANN, 2012).

2. Objetivos

O objetivo deste trabalho foi utilizar a combinação do Knearest, Rosetta e APSIM (KRAc) como ferramenta para aumentar informação sobre o fluxo de óxido nitroso em canaviais brasileiros típicos a partir de dados medidos em campo. Para atingir este propósito os fluxos de óxido nitroso foram comparados com os valores previstos usando KRAc. A estimação do parâmetro Kdenit foi feita usando dados do tratamento T2 (14 t de palha/ha); o parâmetro fixado neste passo foi então utilizado para simular os tratamentos T1 (7 t de palha/ha) e T3 (21 t de palha/ha) (executando um passo de validação operacional do acoplamento de softwares).

3. Material e Métodos

3.1. Dados experimentais

O experimento para a coleta de N_2O ocorreu em uma fazenda localizada na cidade de Piracicaba-SP (Estado de São Paulo, Brasil: Latitude $22^{\circ}41'26''S$ Longitude $47^{\circ}33'28''W$ (Estado de São Paulo) (CARMO et al., 2012). Esta fazenda tem sido usada por 20 anos para o cultivo de cana-de-açúcar e desde 2010 adota a colheita mecanizada da cana crua, sem uso de fogo. O solo no local do experimento é classificado como *Haplic Ferralsol* (FAO) (CARMO et al., 2012) (Tabela 2).

Tabela 2. Características físico químicas do solo do local das coletas de óxido nitroso (CARMO et al., 2012).

camada	Areia			pH	P	Na	K	Ca	Mg	Al	H ⁺	Mat. Org.
	Argila	Fina	grossa									
cm	%	%	%	H ₂ O	mg/kg	cmolc/ dm ³	cmolc/ dm ³	cmolc/ dm ³	cmolc/ dm ³	cmolc/ dm ³	cmolc/ dm ³	%
0-10	30,1	19,5	41,1	4,8	9	0	0,06	0,26	0,19	1,01	2,81	1,02
10-20	28,4	17,5	45,1	4,7	9	0,01	0,05	0,21	0,14	1,09	2,9	0,99
20-30	27,3	17,1	46,5	4,9	8	0,01	0,03	0,55	0,27	0,78	2,36	0,99

30-40	29,7	16,2	44,7	4,9	7	0	0,03	0,63	0,31	0,78	2,53	1,08
40-50	31,8	15,1	43,5	4,9	5	0,01	0,03	0,61	0,33	0,71	2,1	0,85
50-60	30,5	14,9	43,6	4,9	5	0,01	0,03	0,55	0,32	0,81	2,26	0,73
60-70	32,2	13,7	44	4,5	4	0	0,02	0,09	0,08	1,28	2,53	0,65
70-80	32,6	14,2	43,7	5	5	0,01	0,03	0,63	0,38	0,63	1,72	0,7
80-90	35,3	15,1	42,2	4,9	5	0,01	0,02	0,45	0,3	0,82	1,8	0,62
90-100	34,5	14,5	43,8	4,9	3	0,01	0,02	0,46	0,32	0,68	1,79	0,56

Mat.org. matéria orgânica

O clima da região do experimento é classificado como Cwa (classificação de Köppen) caracterizado como úmido e subtropical com temperatura média no mês mais quente $>10^{\circ}\text{C}$; verão e invernos bem definidos e elevados índices de precipitação no verão (PEEL et al., 2007).

Em 2010, a precipitação acumulada foi de 1431,1 mm (20% deste valor foi registrado em Janeiro e Fevereiro). Durante a coleta de gases (Nov/2010 até out/2011), a chuva acumulada foi de 1762,5 mm (ZOTELLI, 2012) (Figura 4).

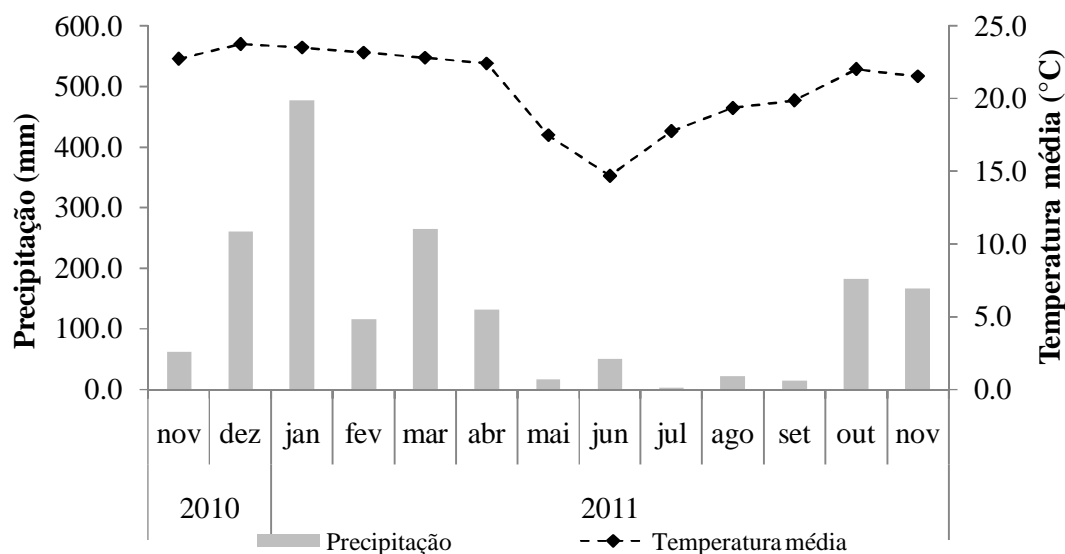


Figura 4. Precipitação mensal e temperatura média na área experimental no período de novembro de 2010 a novembro de 2011.

Fonte: (ZOTELLI, 2012).

Os dados meteorológicos utilizados neste trabalho foram coletados em uma estação localizada a 2100 metros do local do experimento e estão disponíveis na internet (CTC, 2012b).

A variedade da cana-de- açúcar utilizada foi a CTC-15 descrita como rústica e flexível quanto a requerimentos climáticos e de solo (CTC, 2012a). A fertilização com nitrato de amônio (NH_4NO_3) foi aplicada superficialmente nas linhas em 18/11/2010 (Tabela 3). Não se aplicou calcário para o plantio do experimento (CARMO et al., 2012).

Tabela 3. Detalhes de fertilização adaptado de (ZOTELLI, 2012)

Nutriente	Nitrogênio (N)	Fósforo (P_2O_5)	Potássio (K_2O)
Fonte	Nitrato de amônio	Superfosfato triplo	Cloreto de Potássio
Teor [%]	32,0	42,0	60,0
Dose [kg ha^{-1}]	120,0	30,0	150,0
g câmara ⁻¹	5,4	1,4	6,8

Foram usados os valores médios por hora ($n=8$) dos fluxos de óxido nitroso para atmosfera em três diferentes tratamentos quanto a dosagem de palha mantida, após colheita, no solo de um canavial depois de seu primeiro corte: T1 (7 toneladas), T2 (14 toneladas), T3 (21 toneladas) (blocos randômicos, fatorial 4×2 e sem aplicação de vinhaça) (CARMO et al., 2012) multiplicados por 24 horas para produzir a estimativa da quantidade diariamente. As medidas foram realizadas com câmaras estáticas colocadas na linha da cana-de-açúcar após o primeiro corte (Figura 5).



Figura 5. Câmara de coleta de gases com seringa e frascos vedados.
Adaptado de Zotelli (2012).

Estas medidas se iniciaram em novembro/2010 e terminaram em outubro/2011 e ocorreram nos seguintes dias após a fertilização: 1°, 4°, 6°, 8°, 14°, 22°, 29°, 53°, 74°, 98°, 134°, 160°, 188°, 216°, 253°, 287°, 314° (ZOTELLI, 2012).

A infraestrutura computacional utilizada neste trabalho foi: hardware- ACER. Software .3680, Microsoft Windows 5.1 (compilação.xsp.080413-2111: *Service Pack 3*) e APSIM 7.4-r2286, K-Nearest (v1.00.01) e Rosetta (v1.0).

3.2. Simulações no APSIM

No conjunto dos diversos módulos que se conectam ao APSIM, aquele denominado SOILN (PROBERT *et al.*, 1998) mecanisticamente processa elementos do ciclo do nitrogênio usando como entrada a saída de outros módulos como SOILWAT (PROBERT *et al.*, 1998) para a previsão do conteúdo de água no solo (APSIM, 2012); a dinâmica da material orgânico sobre o solo é descrita pelo SURFACE-OM (THORBURN, P. J. et al., 2001).

As simulações foram iniciadas 20/04/2009 em um passo diário de simulação. A cronologia dos eventos simulados esta sumarizada na Tabela 4.

Tabela 4. Cronologia dos eventos na simulação

Data	Evento na simulação
20/04/2009	Início
09/05/2009	Início do ciclo da cana planta
16/05/2009	Fertilização
31/10/2010	Colheita
	Re-inicialização do nitrogênio e do material orgânica sobre
01/10/2010	o solo – início do ciclo da cana soca
18/11/2010	Fertilização
25/10/2011	Colheita
01/12/2011	Simulação

Os valores das emissões de N₂O utilizadas foram coletados em diversos dias após a fertilização (Tabela5).

Tabela 5. Dias das coletas utilizadas como referência

Data	Dias após a fertilização
19/11/2010	1
22/11/2010	4
24/11/2010	6
26/11/2010	8
02/12/2010	14
10/12/2010	22
17/12/2010	29
10/01/2011	53
31/01/2011	74
24/02/2011	98
01/04/2011	134

27/04/2011	160
25/05/2011	188
22/06/2011	216

3.3. Parâmetros de entrada comum a todas as simulações

As simulações foram ordenadas em função da estrutura de diretórios (Figura 6).

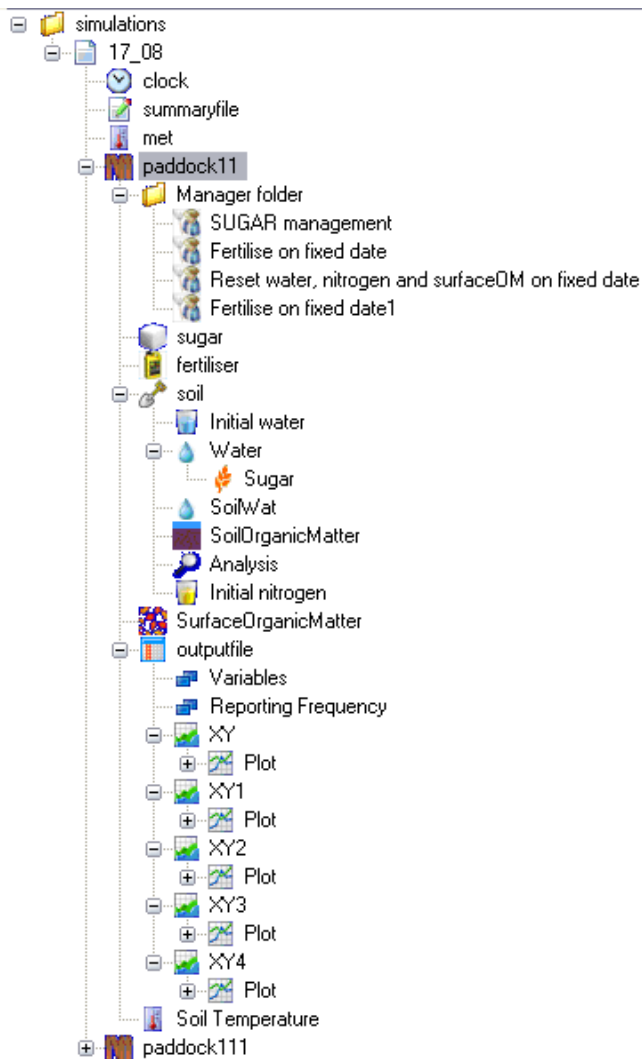


Figura 6. Estrutura de diretórios da simulação

3.3.1. Módulo *Sugar Cane*

Dentre as variedades da biblioteca do APSIM aquela utilizada como modelo virtual da CTC-15 foi a Q117, uma variedade australiana. A maioria dos parâmetros padrões do módulo *Sugar Cane* foram mantidos em seus valores originais, exceto pela adição de 0,5 para ao primeiro estágio de perfilhamento (“*tillering*”) para considerar observações de campo, em que variedades brasileiras tenderam a um perfilhamento mais rápido em relação à australiana. Outro parâmetro modificado foi o *stalk density* assumido como 2/m² que foi necessário para garantir que a produção (massa de cana fresca) observada (ZOTELLI, 2012) se iguale-se à simulada (tratamento T2) (Tukey, $p < 0,05$).

3.3.2. SoilN

Os parâmetros de entrada do solo foram assumidos de acordo com os valores medidos em outro experimento, realizado próximo ao de coleta de gases, e classificado como Xanthic Ferralsol (FAO) (Tabela 6) (LACLAU, 2005; BATTIE LACLAU, LACLAU, 2009). O perfil virtual do solo foi particionado em várias camadas (cm) 0-20;20-40;40-60;60-100;100-200;200-300;300-400;400-500;500-600.

Tabela 6. Características físico química do solo medidos por Laclau et al. Adaptado de (BATTIE LACLAU, LACLAU, 2009).

camada	pH	CTC	Ca	Mg	K	Al	areia	silte	argila	Carbono orgânico
cm	(CaCl ₂)	(cmol+/kg)	(cmol+/kg)	(cmol+/kg)	(cmol+/kg)	(cmol+/kg)	%	%	%	%
0-20	4	8,71	0,27	0,17	0,24	1,8	39	7	54	0,795
20-40	4,1	8,15	0,4	0,23	0,9	1,3	36	7	57	0,597
40-60	4,1	7,64	0,43	0,2	0,2	1,23	41	5	54	0,365
60-100	4,5	3,8	0,7	0,2	0	0,4	35	6	59	0,232
100-200	4,7	2,9	0,15	0,1	0,2	0,26	33	22	45	0,099
200-300	5,1	2,6	0,14	0,4	0,6	0,1	33	19	48	0,273
300-400	4,7	2,66	0,1	0,3	0,6	0,2	34	19	47	0,232

400-500	4,2	3,19	0,2	0,2	0,9	0,6	35	25	40	0,116
500-600	4,2	3,33	0,2	0,1	1,3	0,8	39	25	36	0,116

Dois parâmetros foram modificados: k_1 (difusidade na sub-rotina de desnitrificação) assumido como 12,38 (DELGROSSO et al., 2000) como ajuste a textura do solo no local da coleta de gases. Assim como o efeito do pH na nitrificação assumido para iniciar em 3, máximo entre 6 e 8, e atingir zero novamente em pH 9 (MOREIRA, SIQUEIRA, 2006).

O nitrogênio na forma de nitrato inicial foi ajustado de acordo com as medidas em campo (do nitrogênio total) na profundidade de 0 a 60 cm (ZOTELLI, 2012), nas demais camadas e para os valores de amônio assumiu-se o nitrogênio em 0 ppm (Tabela 7).

Tabela 7. Nitrogênio inicial

Profundidade (cm)	NO_3^- ppm	NH_4^+ ppm
0-20	3.51	0
20-40	6.16	0
40-60	2.82	0
60-600	0	0

3.3.3. Parametrização SOILWAT

Os parâmetros de entrada do módulo SOILWAT: DUL (capacidade de campo), LL (ponto de murcha permanente), SAT (saturação), Air dry (água estrutural e ao ar seco), KS (condutividade hidráulica na saturação) θ_S e θ_R (da equação de Van Genuchten) foram estimados pelas repostas dos modelos KNEAREST (usando base de dados padrão) (USDA) e Rosetta (USDA). Como entradas destes programas foram usados os valores medidos (BATTIE LACLAU, LACLAU, 2009) de areia, silte e argila e densidade do solo para cada camada (Figura 7).

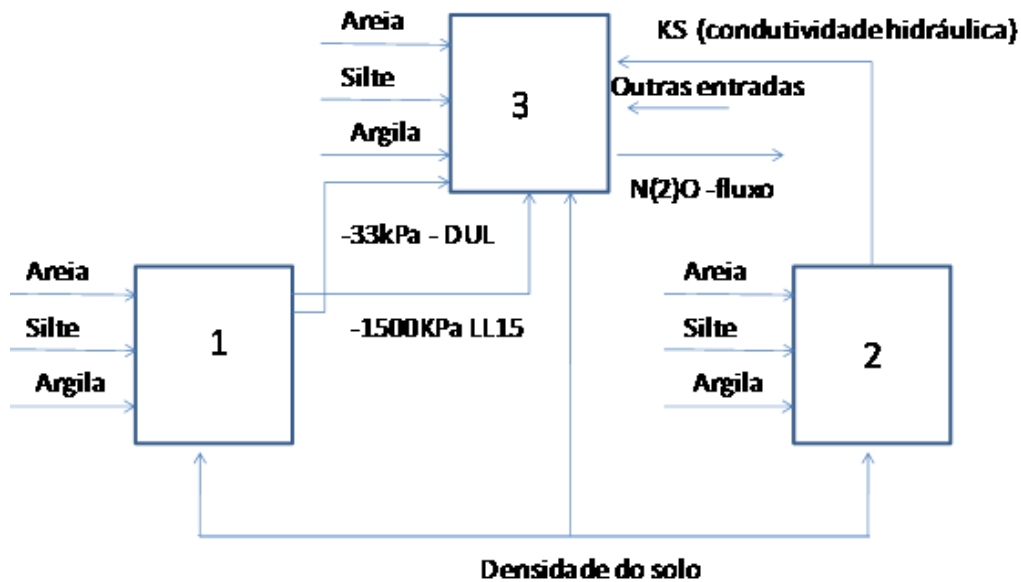


Figura 7. Diagrama Esquemático da abordagem de acoplamento: KRAc.1 K-nearest, 2-Rosetta, 3 - APSIM

O particionamento quantitativo e qualitativo do carbono no solo, parâmetros específicos da interação cultura água no solo e demais parâmetros de entrada do SOILWAT foram assumidos como iguais aos valores encontrados em plantações de cana-de-açúcar em um “red Kandasol” da Austrália na localidade de Bundaberg (THORBURN, P. et al., 2003). Uma exceção foi o parâmetro SWCON que foi ajustado de acordo com a quantidade de argila medida em Piracicaba até a profundidade de 2,5m e repetida a partir desta profundidade. A profundidade máxima da raiz virtual foi fixada em 3 metros.

3.3.4. Parametrização do Módulo surface OM

Foi assumido que na fase cana planta (colhida em campo, crua, mecanicamente, sem uso de fogo) e a fase cana soca iniciaram com a mesma quantidade inicial de palha sobre o solo e uma taxa de decaimento médio para todos os tratamentos de 0,57 (ZOTELLI, 2012). Na transição entre a fase planta e soca a quantidade de palha sobre o solo e o nitrogênio no solo foi reiniciado, o conteúdo de água no solo foi mantido.

3.4. Calibração da denitrificação

Após a checagem do balanço de água e nitrogênio (através da verificação de ausência de stress da planta simulado) e da produção de cana-de-açúcar, o ciclo do nitrogênio foi avaliado com ênfase na denitrificação. Os resultados das simulações foram comparados com os dados do tratamento T2. Foi detectada a necessidade de alteração do parâmetro K_{denit} após a variação do mesmo e a computação do índice RMSE que sumarizou os resultados. O conjunto de parâmetros avaliados está detalhado na Tabela 8.

Tabela 8. Detalhamento das simulações e parâmetros utilizados.

Simulações: Tratamento – Conjunto de parâmetros	Parâmetro ajustado: K_{denit}
T2-P1	0.001379 (THORBURN et al., 2010)
T2-P2	0.0006 – padrão do módulo
T2-P3	0.0002 - assumido

A sumarização dos resultados pelo RMSE é representada pela seguinte fórmula:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{t=1}^n (o_t - p_t)^2}$$

t = identificador da observação n = número total de observações

o = observado p = predito

Então, os fluxos de N_2O de diferentes tratamentos (diferença em relação a quantidade de palha sobre a superfície): T1- 7 t palha/ha, T2 – 14 t palha/ha T3- 21 t palha/ha (CARMO et al., 2012) foram analisados. Inicialmente foram realizadas simulações com três parâmetros distintos (P1, P2, P3) e comparados com os valores medidos em T2. O parâmetro selecionado foi então utilizado para simular T1 e T3.

4. Resultados

Nenhum estresse significativo da cultura virtual relacionado à água e nitrogênio em relação às observações de campo foi verificado nas simulações (T2-Pn) cujos resultados (ciclo da cana-soca) foram matematicamente e graficamente analisados nas Figuras: 8, 9, 10, as setas indicam o momento da fertilização.

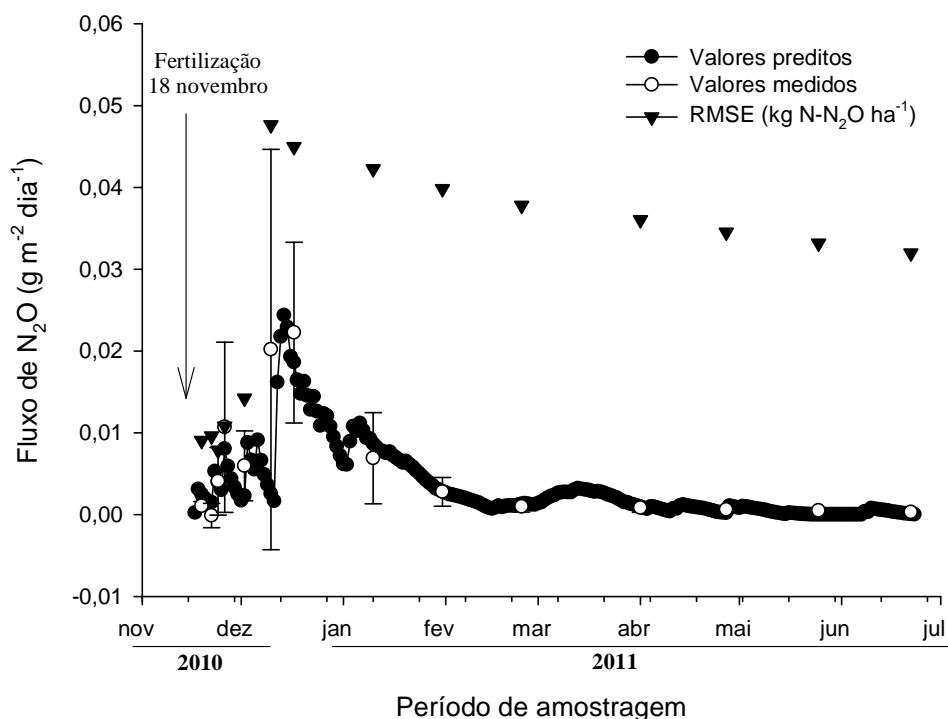


Figura 8. Comparação entre valores medidos e estimados para o tratamento T2 usando Kdenit=0.0002 (P3).

A Figura 8 demonstra que o uso do parâmetro P3 produziu um ajuste com um máximo RMSE 0,047 Kg N-N₂O/ha (dia 10/12/2010) e que após esse dia decaiu continuamente até um valor de 0,031 Kg N-N₂O/ha (dia 22/06/2011). O maior degrau positivo no RMSE ocorreu nos valores observados no dia 10/12/2010.

A figura 9 demonstra que o uso do parâmetro P1 gerou um ajuste com RMSE máximo de 0,256 Kg N-N₂O/ha (17/12/2010) após isto houve um decaimento contínuo

até o valor de 0,159 Kg N-N₂O/ha (dia 22/06/2011). O maior degrau positivo verificado no RMSE ocorreu nos valor observado no dia 10/12/2010.

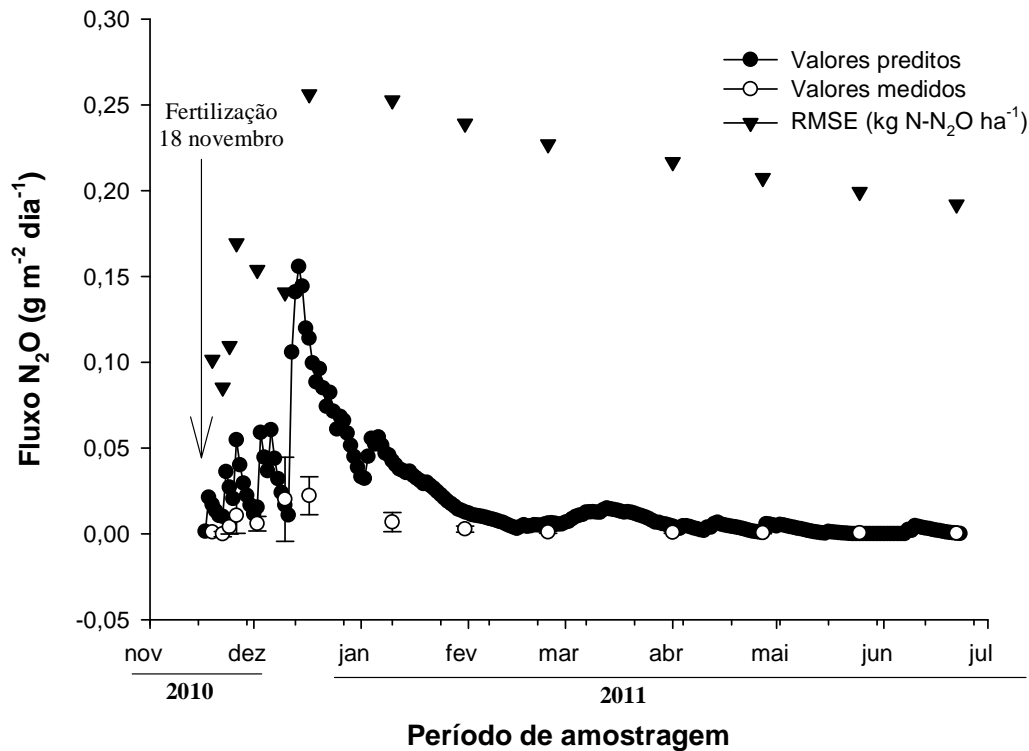


Figura 9. Comparação entre valores medidos e estimados para o tratamento T2 usando $K_{denit}=0.001379$ (P1)

A Figura 10 mostra que o uso do parâmetro P2 como entrada produziu um ajuste com máxima RMSE 0,093 (no dia 10/12/2010) após esta data houve um decaimento contínuo até o valor de 0,0709 Kg N-N₂O/ha (dia 22/06/2011Kg N-N₂O). O principal degrau positivo no RMSE ocorreu devido aos valores medidos em 10/12/2010. De 19/11/2012 até 10/12/2010 e o RMSE apresentou (com exceção de 22/11/2010) tendências de aumento.

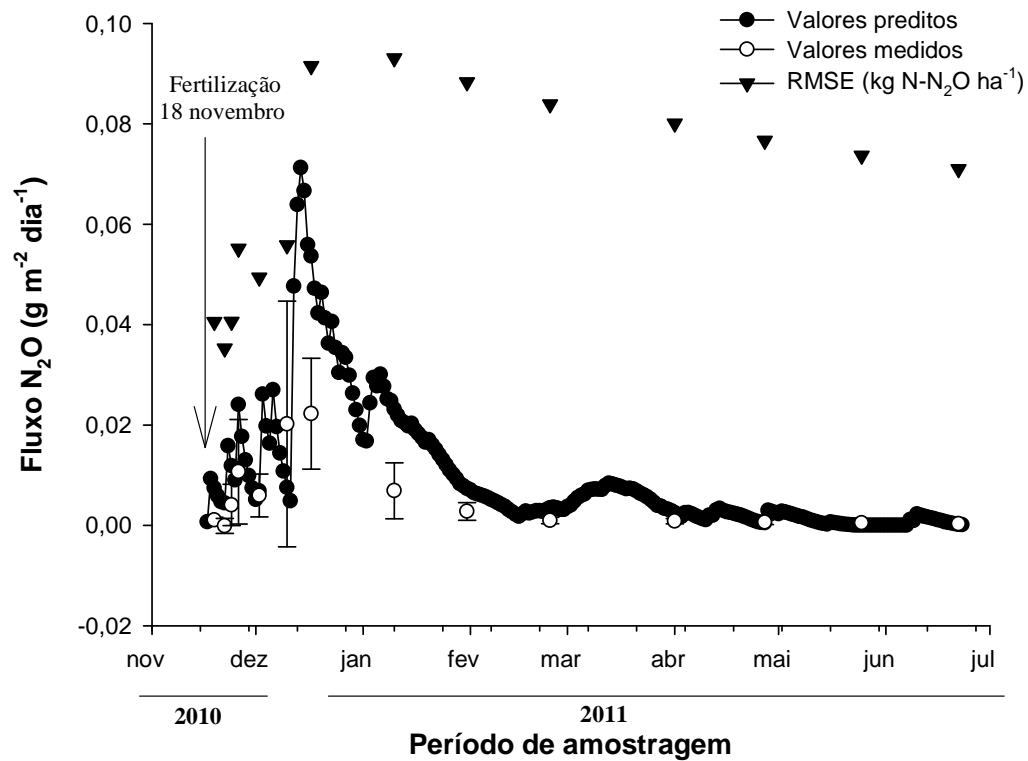


Figura 10. Comparação entre valores medidos e estimados para o tratamento T2 usando $K_{denit}=0.0006$ (P2)

A partir da constatação de que o melhor ajuste ocorreu na simulação T2-P3 produzindo um valor máximo RMSE $0,047\ Kg\ N-N_2O/ha$, o parâmetro P3 foi então utilizado para simular os tratamentos T1 e T3 (Figura 11 e Figura 12).

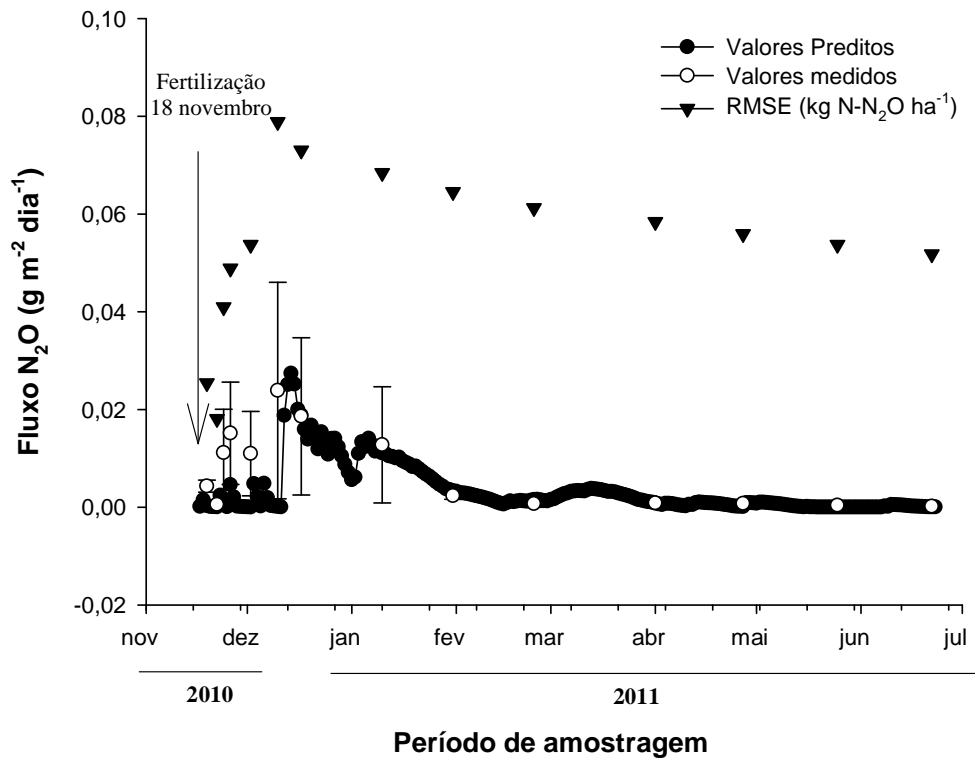


Figura 11. Comparação entre valores medidos e estimados para o tratamento T1 usando $K_{denit}=0.0002$ (T1-P3).

A Figura 11 permite a comparação gráfica entre o valor simulado e o medido em T1. O máximo RMSE observado foi de 0,0788 Kg N-N₂O/ha (no dia 10/12/2010) e após este dia apresentou um contínuo decaimento até o valor de 0,052 Kg N-N₂O/ha (no dia 22/06/2011). O principal degrau positivo no valor do RMSE foi observado no dia 10/12/2010. De 19/11/2012 até 10/12/2010 o RMSE apresentou tendência de aumento com exceção do observado no dia 22/11/2010.

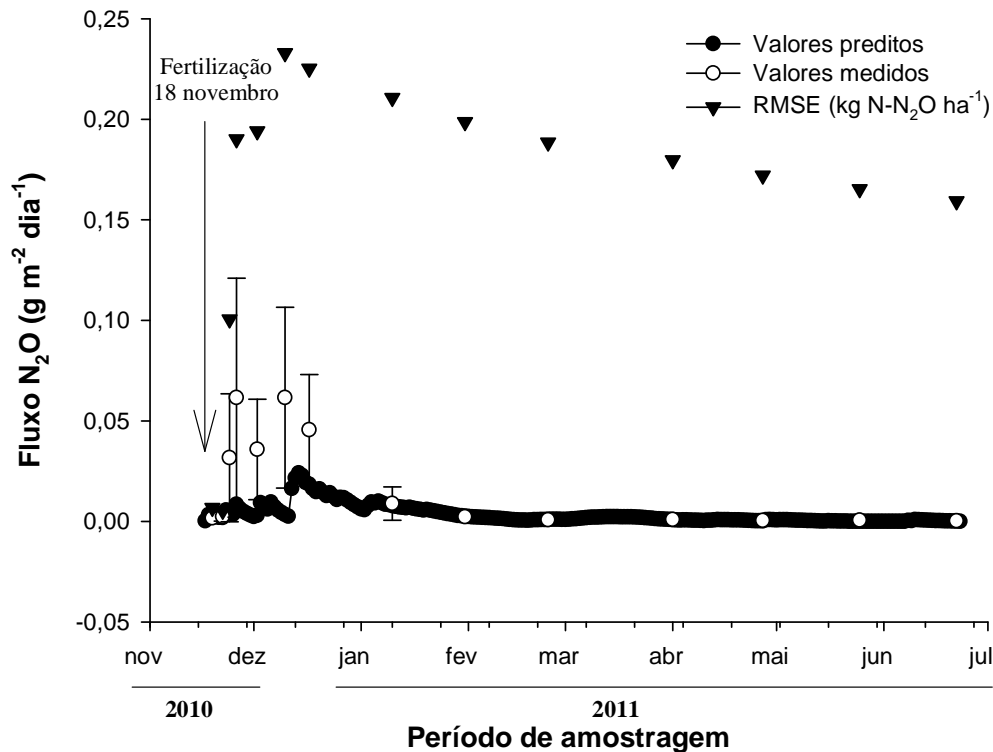


Figura 12. Comparação entre valores medidos e estimados para o tratamento T3 usando $K_{denit}=0.0002$ (T3-P3).

A Figura 12 mostra os resultados da simulação T3-P3 produziram um ajuste com um RMSE máximo 0,256 Kg N-N₂O/ha (no dia 14/12/2010). Após esta data houve um decaimento contínuo até o valor de 0,192 Kg N-N₂O/ha (no dia 22/06/2011). O principal degrau positivo ocorreu no dia 14/12/2010. Nenhuma tendência principal foi identificada após esta data.

5. Discussão

Aplicações do APSIM quanto à cultura da cana-de-açúcar estão disponíveis na literatura ainda escassas, (THORBURN, P. J. et al., 2001; STEWART et al., 2006; THORBURN et al., 2010), Considerando que, geralmente, os estudos de emissões de gases de efeito estufa como o óxido nítrico apresentam desvios padrões

consideravelmente maiores que em outros campos de estudo científico e somado ao fato de que os dados utilizados neste trabalho não foram produzidos com este enfoque, de subsidiar um estudo centrado em ferramentas computacionais, a abordagem KRAC apresentou resultados positivos.

A constatação de que este ter sido todo realizado em uma interface visual amigável, com dados básicos de entrada e sem a necessidade de conhecimentos de programação, tornam a abordagem KRAC acessível a uma grande quantidade de usuários. A dinâmica da simulação foi bem representada para a condição comercialmente usual de 14 t de palha/ha com um RMSE máximo de 0,047g N-N₂O/ha em contraste com o valor considerado aceitável de 0,62 KgN/ha na simulação da denitrificação (THORBURN,2010). Estes dados sinalizam que a abordagem pode subsidiar estudos para delimitação de fronteiras (FARQUHARSON ,BALDOCK, 2008) sobre a emissão de óxido nitroso e portanto a somatória destes fatores indica que a abordagem deve continuar a ser explorada cientificamente.

Parte dos erros encontrados na simulação pode ser atribuídos ao pressuposto de que a espécie vegetal em questão não utilizaria amônio em seu metabolismo, contrariamente ao que foi relatado por (ROBINSON et al., 2011), onde houve o uso preferencial de nitrogênio na forma de amônia em épocas de chuva com maiores emissões de óxido nitroso. Embora, em simulação realizada no presente trabalho, permitindo o uso de amônio pela cana-de-açúcar, (dados não apresentados) na simulação T2-P3, não constatou-se ajuste matemático significativamente melhor (RMSE difere apenas a partir da quarta casa decimal).

O ajuste razoável da simulação T2-P3 à dinâmica dos fluxos de óxido nitroso, dada a dependência destes do conteúdo de água no solo, indicou que provavelmente o K-Nearest e o Rosetta produziram estimativas que ao servirem de entrada ao APSIM não introduziram erros de grande magnitude na estimativa da referida dinâmica.

Considerando que o valor do Kdenit na rotina do APSIM ter sido calibrada para o valor de 0,0002 ser consideravelmente menor que o 0,001379 previamente relatado (THORBURN et al., 2010), pode estar relacionado a uma superestimativa dos fluxos diários de óxido nitroso, uma vez que, este valor foi extrapolado a partir de medições concentradas em um horário específico do dia o que, provavelmente, não afetou a qualidade do ajuste da dinâmica da simulação no qual Kdenit é um parâmetro linear no computo da denitrificação.

Outro elemento que poderia estar interferindo é a diferenciação entre o perfil de matéria orgânica no local no qual os gases foram coletados e aquele usado como referência, apesar de serem relativos a localidades próximas da mesma fazenda. A diferença da quantidade de matéria orgânica potencializa um diferencial na respiração aeróbia e acelera a formação distinta de microsítios anaeróbios, condição suficiente para o aumento da probabilidade de ocorrência da denitrificação heterotrófica (FARQUHARSON ,BALDOCK, 2008), além de ser um dos fatores multiplicativos da taxa de denitrificação. Assim como, a decomposição no APSIM, com parâmetros padrão, foi mais acelerada que a verificada no Brasil para diferentes resíduos agrícolas (NASCIMENTO et al., 2011) o que talvez se estenda para a palha da cana-de-açúcar e implicasse em mais nitrogênio disponível para o processo de denitrificação na simulação com ênfase no ajuste minorado do K_{denit} .

A constatação de que o máximo RMSE em T3-P3 (Figura 8) foi aproximadamente 300% superior que aquele relativo à simulação T1-P3 (Figura 11). Isto indicou que a abordagem proposta produz melhores respostas na dosagem média de palha (14 t palha/ha), no entanto a abordagem poderia ser aplicada com melhores resultados para dosagens menores (7 t palha/ha) se comparada às dosagens maiores (21 t palha/ha). O potencial prático da abordagem proposta é reforçado pelo fato de que o melhor resultado ter sido verificado em condições médias e usuais da aplicação da palha sobre o solo. Os elevados valores de RMSE nos períodos iniciais da simulação podem estar relacionados à retenção de fertilizante sobre a palha. Medidas em campo (dados não mostrados) apresentam picos mais pronunciados de nitrato nas camadas superiores do solo, logo após a adubação, nos tratamentos com menor quantidade de palha sobre o solo (ZOTELLI, 2012).

O valor assumido ($2/m^2$) para a variável *stalk density* não é o usual nas observações de campo, por isso deve ser objeto de uma análise detalhada. No entanto, o balanço do nitrogênio via fixação da igualdade (Tukey $p < 0,05$), da produtividade simulada e medida (73,7 t/ha – massa fresca) em T2 e do stress relativo a nitrogênio e água, diminuem a importância da diferença observada no valor do *stalk density*.

Logo, a consolidação do uso KRAC pode potencialmente subsidiar otimizações no gerenciamento da fertilização nitrogenada, como foi observado em resultados de estudo que preconiza a semeadura tardia do arroz embasada em respostas de simulações realizadas no APSIM (STONE ,HEINEMANN, 2012).

6. Conclusões

O acoplamento de softwares KNEAREST - ROSETTA –APSIM (KRAC) apresentou resultados positivos quando simulando a dinâmica das emissões de N₂O em condições típicas do cultivo de cana-de-açúcar no Brasil.

Demonstrou também perspectiva para ser um componente para a tomada de decisão na partição da palha entre a proteção do solo, produção de etanol de segunda geração e cogeração termoelétrica, considerando as emissões de N₂O.

O uso deste acoplamento de softwares no Brasil pode auxiliar no preenchimento de lacunas de informação (GROSSO et al., 2012; VENTEREA et al., 2012) e conduzir à melhoria do gerenciamento da fertilização nitrogenada como estratégia de minimização de emissões de óxido nitroso.

Os softwares avaliados podem subsidiar futuros estudos de possíveis metodologias de cálculo mais acuradas para o estabelecimento de novas estratégias de larga escala, relacionadas à planificação do uso do solo e construção de cenários como as realizadas pelo painel intergovernamental de mudanças climáticas.

O acoplamento KRAC deve continuar a ser explorado cientificamente como uma potencial ferramenta para países em desenvolvimento ganharem conhecimento sobre emissões de óxido nitroso sem custo com licenças de uso e a partir de dados de relativo baixo custo de obtenção (textura do solo e densidade do solo) como os utilizados no presente trabalho.

7. Referências Bibliográficas

Alves, J. M. B., A. A. Costa, S. S. Sombra, J. N. B. Campos, F. D. A. D. Souza Filho, E. S. P. R. Martins, E. M. D. Silva, A. C. S. D. Santos, H. A. Barbosa, W. L. B. Melciades e D. F. Moncunnil. Um estudo inter-comparativo de previsão sazonal estatística-dinâmica de precipitação no nordeste do Brasil. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v.22, p.354-372. 2007.

Apsim.

[http://www.apsim.info/Wiki/\(S\(uzsttpiv4kkn0f45cqeawn45\)\)/Default.aspx?Page=APSI](http://www.apsim.info/Wiki/(S(uzsttpiv4kkn0f45cqeawn45))/Default.aspx?Page=APSI)

[M-Documentation&NS=&AspxAutoDetectCookieSupport=1.](#) DOCUMENTATION.

2012 2012

Azadi, H., S. De Jong, B. Derudder, P. De Maeyer e F. Witlox. Bitter sweet: How sustainable is bio-ethanol production in Brazil? **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v.16, n.6, p.3599-3603. 2012

Battie Laclau, P. e J.-P. Laclau. Growth of the whole root system for a plant crop of sugarcane under rainfed and irrigated environments in Brazil. **Field Crops Research**, v.114, n.3, p.351-360. 2009.

Bergamasco, A. F., F. C. D. Silva, L. H. A. Rodrigues e P. C. O. Trivelin. Aplicabilidade do Modelode Balanço de Nitrogênio para Previsão de Respostada Cana-de-Açúcar aoFertilizante Nitrogenado. Embrapa. Campinas, p.1-8. 2002

Bortolon, E. S. O., J. Mielniczuk, C. G. Tornquist, F. Lopes e F. F. Fernandes. Simulação da dinâmica do carbono e nitrogênio em um Argissolo do Rio Grande do Sul usando modelo Century. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v.33, p.1635-1646. 2009.

Botula, Y.-D., A. Nemes, P. Mafuka, E. Van Ranst e W. M. Cornelis. Prediction of Water Retention of Soils from the Humid Tropics by the Nonparametric k-Nearest Neighbor Approach. **gsvadzone**, v.0, n.0, p.-. 2012.

Buchholz, T., E. Rametsteiner, T. A. Volk e V. A. Luzadis. Multi Criteria Analysis for bioenergy systems assessments. **Energy Policy**, v.37, n.2, p.484-495. 2009.

Carmo, J. B. D., C. A. D. Andrade, C. C. Cerri e M. D. C. Piccolo. Disponibilidade de nitrogênio e fluxos de N₂O a partir de solo sob pastagem após aplicação de herbicida. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v.29, p.735-746. 2005.

Carmo, J. B. D., S. Filoso, L. C. Zotelli, E. R. De Sousa Neto, L. M. Pitombo, P. J. Duarte-Neto, V. P. Vargas, C. A. Andrade, G. J. C. Gava, R. Rossetto, H. Cantarella, A.

E. Neto e L. A. Martinelli. Infield greenhouse gas emissions from sugarcane soils in Brazil: effects from synthetic and organic fertilizer application and crop trash accumulation. **GCB Bioenergy**, p.n/a-n/a. 2012.

_____. Infield greenhouse gas emissions from sugarcane soils in Brazil: effects from synthetic and organic fertilizer application and crop trash accumulation. **GCB Bioenergy**, p.n/a-n/a. 2012

Carmo, J. B. D., M. D. C. Piccolo, C. A. D. Andrade, C. E. P. Cerri, B. J. Feigl, E. S. Neto e C. C. Cerri. Short-term changes in nitrogen availability, gas fluxes (CO₂, NO, N₂O) and microbial biomass after tillage during pasture re-establishment in Rondônia, Brazil. **Soil and Tillage Research**, v.96, n.1-2, p.250-259. 2007.

Chen, C. e W. A. Payne. Measured and Modeled Unsaturated Hydraulic Conductivity of a Walla Walla Silt Loam. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.65, n.5, p.1385-1391. 2001.

Corbière-Nicollier, T., I. Blanc e S. Erkman. Towards a global criteria based framework for the sustainability assessment of bioethanol supply chains: Application to the Swiss dilemma: Is local produced bioethanol more sustainable than bioethanol imported from Brazil? **Ecological Indicators**, v.11, n.5, p.1447-1458. 2011.

Crutzen, P. J., A. R. Mosier e K. A. Smith. N₂O release from agro-biofuel production negates global warming reduction by replacing fossil fuels. **Atmos. Chem. Phys.**, p.389-395. 2008.

Ctc. <http://www.ctcanavieira.com.br/>. Piracicaba: Centro de tecnologia canavieira. 2012 2012a

_____. <http://www.ctcanavieira.com.br/Clima/index.jsp>. 2012 2012b

Del Grosso, S. J., A. R. Mosier, W. J. Parton e D. S. Ojima. DAYCENT model analysis of past and contemporary soil N₂O and net greenhouse gas flux for major crops in the USA. **Soil and Tillage Research**, v.83, n.1, p.9-24. 2005.

Delgrosso, S. J., W. J. Parton, A. R. Mosier, D. S. Ojima, A. E. Kulmala e S. Phongpan. General model for N₂O and N₂ gas emissions from soils due to denitrification. **Global Biogeochemical Cycles**, v.14, n.4, p.1045-1060. 2000.

Demirbas, M. F., G. Adami, L. R. Bakken e G. Cao. Recent advances on the production and utilization trends of bio-fuels: A global perspective. **Energy Conversion and Management**, v.47, p.2371-2381. 2006.

Diniz, T. G. Recursos hídricos no Distrito Federal: Modelagem hidrológica para subsidiar a gestão sustentável na Bacia do Piripau. Instituto de Geociências, Universidade de Brasília, Brasília, 2012. 148 p.

Farquharson, R. e J. Baldock. Concepts in modelling N₂O emissions from land use. **Plant and Soil**, v.309, n.1-2, p.147-167. 2008.

Galdos, M. V., C. C. Cerri, C. E. P. Cerri, K. Paustian e R. Van Antwerpen. Simulation of Soil Carbon Dynamics under Sugarcane with the CENTURY Model. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.73, n.3, p.802-811. 2009.

Gérard, F., M. Tinsley e K. U. Mayer. Preferential Flow Revealed by Hydrologic Modeling Based on Predicted Hydraulic Properties. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.68, n.5, p.1526-1538. 2004.

Giltrap, D. L., C. Li e S. Sagar. DNDC: A process-based model of greenhouse gas fluxes from agricultural soils. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v.136, n.3-4, p.292-300. 2010

Goldemberg, J. Ethanol for a Sustainable Energy Future. **Science**, v.315, n.5813, p.808-810. 2007.

Green, T. R., L. R. Ahuja e J. G. Benjamin. Advances and challenges in predicting agricultural management effects on soil hydraulic properties. **Geoderma**, v.116, n.1-2, p.3-27. 2003.

Grosso, S. J. D., W. J. Parton, A. P. R., S. C. Davis, C. Keough e E. Marx. Chapter 14 - DayCent Model Simulations for Estimating Soil Carbon Dynamics and Greenhouse Gas Fluxes from Agricultural Production Systems. In: (Ed.). Managing Agricultural Greenhouse Gases. San Diego: Academic Press, 2012. Chapter 14 - DayCent Model Simulations for Estimating Soil Carbon Dynamics and Greenhouse Gas Fluxes from Agricultural Production Systems, p.241-250

Heinen, M. Simplified denitrification models: Overview and properties. **Geoderma**, v.133, n.3-4, p.444-463. 2006.

Huth, N. I., P. J. Thorburn, B. J. Radford e C. M. Thornton. Impacts of fertilisers and legumes on N₂O and CO₂ emissions from soils in subtropical agricultural systems: A simulation study. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v.136, n.3-4, p.351-357. 2010.

Jorgensen , S. E. e R. A. Vollenweider, Eds. Principios para o gerenciamento de lagos. Diretrizes para o gerenciamento de lagos. São Carlos: ILEC; IIE; UNEP, v.I, p.202, Diretrizes para o gerenciamento de lagos. 2000.

Keating, B. A., P. S. Carberry, G. L. Hammer, M. E. Probert, M. J. Robertson, D. Holzworth, N. I. Huth, J. N. G. Hargreaves, H. Meinke, Z. Hochman, G. Mclean, K. Verburg, V. Snow, J. P. Dimes, M. Silburn, E. Wang, S. Brown, K. L. Bristow, S. Asseng, S. Chapman, R. L. Mccown, D. M. Freebairn e C. J. Smith. An overview of APSIM, a model designed for farming systems simulation. **European Journal of Agronomy**, v.18, n.3-4, p.267-288. 2003.

Khalil, K., P. Renault, N. Guérin e B. Mary. Modelling denitrification including the dynamics of denitrifiers and their progressive ability to reduce nitrous oxide: Comparison with batch experiments. **European Journal of Soil Science**, v.56, n.4, p.491-504. 2005.

Laclau, P. R. F. B. Balanço hídrico e crescimento de raízes da cana-de-açúcar sob disponibilidade de água contrastante comparados ao modelo MOSICAS

Agromonomia/Fitotecnia, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2005. 125 p.

Laudone, G. M., G. P. Matthews, N. R. A. Bird, W. R. Whalley, L. M. Cardenas e A. S. Gregory. A model to predict the effects of soil structure on denitrification and N₂O emission. **Journal of Hydrology**, v.409, n.1, p.283-290. 2011.

Lorenconi, R., D. Dourado Neto e A. B. Heinemann. Calibração e avaliação do modelo ORYZA-APSIM para o arroz de terras altas no Brasil. **Revista Ciência Agrônômica**, v.41, p.605-613. 2010.

Macedo, I. C. Avaliação da Expansão da Produção de Etanol no Brasil: CGEE 2004

Maggi, F. A Mechanistic Treatment of the Dominant Soil Nitrogen Cycling Processes: Model Development, Testing, and Application 2008

Maier, H. R. e G. C. Dandy. Neural networks for the prediction and forecasting of water resources variables: a review of modelling issues and applications. **Environmental Modelling & Software**, v.15, n.1, p.101-124. 2000.

Marin, F. R., M. L. Lopes-Assad, E. D. Assad, C. E. Vian e M. C. Santos. Sugarcane crop efficiency in two growing seasons in São Paulo State, Brazil. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v.43, p.1449-1455. 2008.

Mccown, R. L., G. L. Hammer, J. N. G. Hargreaves, D. Holzworth e N. I. Huth. APSIM: an agricultural production system simulation model for operational research. **Mathematics and Computers in Simulation**, v.39, n.3-4, p.225-231. 1995.

Mccown, R. L., G. L. Hammer, J. N. G. Hargreaves, D. P. Holzworth e D. M. Freebairn. APSIM: a novel software system for model development, model testing and simulation in agricultural systems research. **Agricultural Systems**, v.50, n.3, p.255-271. 1996.

Metay, A., L. Chapuis-Lardy, A. Findeling, R. Oliver, J. A. Alves Moreira e C. Feller. Simulating N₂O fluxes from a Brazilian cropped soil with contrasted tillage practices. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v.140, n.1-2, p.255-263. 2010.

Metay, A., R. Oliver, E. Scopel, J.-M. Douzet, J. Aloisio Alves Moreira, F. Maraux, B. J. Feigl e C. Feller. N₂O and CH₄ emissions from soils under conventional and no-till management practices in Goiânia (Cerrados, Brazil). **Geoderma**, v.141, n.1-2, p.78-88. 2007.

Minasny, B., J. W. Hopmans, T. Harter, S. O. Eching, A. Tuli e M. A. Denton. Neural Networks Prediction of Soil Hydraulic Functions for Alluvial Soils Using Multistep Outflow Data. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.68, n.2, p.417-429. 2004.

Moraes, M. A. F. D. D. Introdução - As profundas mudanças institucionais ao longo da história da agroindústria canavieira e os desafios atuais. **Economia Aplicada**, v.11, p.555-557. 2007.

Moreira, F. M. D. S. e J. O. Siqueira. Microbiologia e Bioquímica do Solo. Lavras: Editora UFLA. 2006. 729 p.

Nascimento, A. F. D., E. D. S. Mendonça, L. F. C. Leite e J. C. L. Neves. Calibration of the century, apsim and ndicea models of decomposition and n mineralization of plant residues in the humid tropics. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v.35, p.917-928. 2011

Nassif, D. S. P., F. R. Marin, W. J. Pallone Filho, R. S. Resende e G. Q. Pellegrino. Parametrização e avaliação do modelo DSSAT/Canegro para variedades brasileiras de cana-de-açúcar. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v.47, p.311-318. 2012.

Nemes, A., W. J. Rawls e Y. A. Pachepsky Use of the Nonparametric Nearest Neighbor Approach to Estimate Soil Hydraulic Properties. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.70, n.2, p.327-336. 2006.

Nemes, A., R. T. Roberts, W. J. Rawls, Y. A. Pachepsky e M. T. Van Genuchten. Software to estimate -33 and -1500;kPa soil water retention using the non-parametric k-Nearest Neighbor technique. **Environmental Modelling & Software**, v.23, n.2, p.254-255. 2008.

Nemes, A., D. J. Timlin, Y. A. Pachepsky e W. J. Rawls. Evaluation of the Rawls et al. (1982) Pedotransfer Functions for their Applicability at the U.S. National Scale **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.73, n.5, p.1638-1645. 2009.

Peel, M. C., B. L. Finlayson e T. A. McMahon. Updated world map of the Koppen-Geiger climate classification. **Hydrol. Earth Syst. Sci.**, v.11, n.5, p.1633-1644. 2007.

Pereira, A. R. e E. C. Machado. Um simulador dinâmico do crescimento de uma cultura de cana-de-açúcar. **Bragantia**, v.45, p.107-122. 1986.

Peres, J. G., C. F. Souza e N. A. Lavorenti. Avaliação dos efeitos da cobertura de palha de cana-de-açúcar na umidade e na perda de água do solo. **Engenharia Agrícola**, v.30, p.875-886. 2010.

Portmann, R. W., J. S. Daniel e A. R. Ravishankara. Stratospheric ozone depletion due to nitrous oxide: influences of other gases. **Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences**, v.367, n.1593, p.1256-1264. 2012.

Probert, M. E., J. P. Dimes, B. A. Keating, R. C. Dalal e W. M. Strong. APSIM's water and nitrogen modules and simulation of the dynamics of water and nitrogen in fallow systems. **Agricultural Systems**, v.56, n.1, p.1-28. 1998.

Renouf, M., M. Wegener e R. Pagan. Life cycle assessment of Australian sugarcane production with a focus on sugarcane growing. **The International Journal of Life Cycle Assessment**, v.15, n.9, p.927-937. 2010

Robinson, N., R. Brackin, K. Vinall, F. Soper, J. Holst, H. Gamage, C. Paungfoo-Lonhienne, H. Rennenberg, P. Lakshmanan e S. Schmidt. Nitrate Paradigm Does Not Hold Up for Sugarcane. **PLoS ONE**, v.6, n.4, p.e19045. 2011.

Schaap, M. G., F. J. Leij e M. T. Van Genuchten. Rosetta: a computer program for estimating soil hydraulic parameters with hierarchical pedotransfer functions. **Journal of Hydrology**, v.251, n.3-4, p.163-176. 2001.

Schwen , A., G. H.-R.-E. J. Lawrence-Smith , S. M. Sinton , S. Carrick , B. E. Clothier , G. D. Buchan e W. Loiskandl Hydraulic Properties and the Water-Conducting Porosity as Affected by Subsurface Compaction using Tension Infiltrimeters. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.75, n.3, p.822-831. 2011.

Snyder, C. S., T. W. Bruulsema, T. L. Jensen e P. E. Fixen. Review of greenhouse gas emissions from crop production systems and fertilizer management effects. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v.133, n.3-4, p.247-266. 2009.

Sommer, R., H. Fulster, K. Vielhauer, E. J. M. Carvalho e P. L. G. Vlek. Deep Soil Water Dynamics and Depletion by Secondary Vegetation in the Eastern Amazon. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.67, n.6, p.1672-1686. 2003.

Stewart, L. K., P. B. Charlesworth, K. L. Bristow e P. J. Thorburn. Estimating deep drainage and nitrate leaching from the root zone under sugarcane using APSIM-SWIM. **Agricultural Water Management**, v.81, n.3, p.315-334. 2006.

Stone, L. F. e A. B. Heinemann. Simulação do manejo do nitrogênio em arroz de terras altas com o modelo ORYZA/APSIM 2000. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v.16, p.611-617. 2012.

Suleiman, A. A. e J. T. Ritchie. Modeling Soil Water Redistribution during Second-Stage Evaporation. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.67, n.2, p.377-386. 2003.

Thorburn, P., I. Dart, I. Biggs, C. Baillie, M. Smith e B. Keating. The fate of nitrogen applied to sugarcane by trickle irrigation. **Irrigation Science**, v.22, n.3-4, p.201-209. 2003.

Thorburn, P. J., M. E. Probert e F. A. Robertson. Modelling decomposition of sugar cane surface residues with APSIM-Residue. **Field Crops Research**, v.70, n.3, p.223-232. 2001.

Thorburn , P. J., J. S.Biggs, K.Collins e M. E.Probert. Using the APSIM model to estimate nitrous oxide emissions from diverse Australian sugarcane production systems. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v.136, n.3-4, p.343-350. 2010.

Timm, L. C. Efeito do manejo da palha da cana-de-açúcar nas propriedades físico-hídricas de um solo. (Doutorado). Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, Piracicaba, 2002. 115 p.

Un-Energy. Sustainable Bioenergy: A Framework for decision Makers: United Nations 2004

USA. General Principles of Software Validation. U. S. D. O. H. A. H. Services 2002

Venterea, R. T., A. D. Halvorson, N. Kitchen, M. A. Liebig, M. A. Cavigelli, S. J. D. Grosso, P. P. Motavalli, K. A. Nelson, K. A. Spokas, B. P. Singh, C. E. Stewart, A. Ranaivoson, J. Strock e H. Collins. Challenges and opportunities for mitigating nitrous oxide emissions from fertilized cropping systems. **Frontiers in Ecology and the Environment**, v.10, n.10, p.562-570. 2012.

Xing, H., E. Wang, C. J. Smith, D. Rolston e Q. Yu. Modelling nitrous oxide and carbon dioxide emission from soil in an incubation experiment. **Geoderma**, v.167-168, n.0, p.328-339. 2011

Xiong, Y., R. Wallach e A. Furman. Modeling multidimensional flow in wettable and water-repellent soils using artificial neural networks. **Journal of Hydrology**, v.410, n.1-2, p.92-104. 2011.

Zanatta, J. A., C. Bayer, F. C. B. Vieira, J. Gomes e M. Tomazi. Nitrous oxide and methane fluxes in South Brazilian gleysol as affected by nitrogen fertilizers. **Revista brasileira de Ciência de solo**, v.34, n.5, p.1653-1665. 2010.

Zotelli, L. C. Emissões de CO₂, N₂O e CH₄ a partir de solo com cana-de-açúcar e em função de doses de vinhaça e quantidades de palha.
. (master). Mestrado em Agricultura Tropical e Subtropical
IAC, Campinas, 2012.