

MARCUS METRI CORRÊA

DESENVOLVIMENTO E TESTE DE MODELO DE TRANSPORTE
UNIDIMENSIONAL DE SOLUTOS NO SOLO

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-graduação em Engenharia Agrícola, para obtenção do título de “Doctor Scientiae”.

VIÇOSA
MINAS GERAIS – BRASIL
2001

MARCUS METRI CORRÊA

DESENVOLVIMENTO E TESTE DE MODELO DE TRANSPORTE
UNIDIMENSIONAL DE SOLUTOS NO SOLO

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-graduação em Engenharia Agrícola, para obtenção do título de “Doctor Scientiae”.

APROVADA: 5 de dezembro de 2001.

Prof. Hugo Alberto Ruiz
(Conselheiro)

Prof. Luiz Cláudio Costa
(Conselheiro)

Dr. Camilo de Lelis T. de Andrade
EMBRAPA/Sete Lagoas-MG

Prof. Rubens Alves de Oliveira

Prof. Mauro Aparecido Martinez
(Orientador)

Papai, dedico este trabalho à você.
Tenho certeza que você está feliz por mais uma etapa vencida.
Neste momento de conquista, gostaria de mais um dos seus abraços.

AGRADECIMENTO

O autor expressa os maiores agradecimentos ao professor Mauro Aparecido Martinez pela sua verdadeira orientação, através do seu respeito, sua dedicação, suas valiosas sugestões e participações, seus ensinamentos e sua prezada amizade, permitindo não só a realização desse trabalho mas também o crescimento como pessoa e profissional.

Aos professores Luiz Cláudio Costa e Hugo Alberto Ruiz, pelo constante ensinamento, confiança e amizade.

Ao professor Rubens Alves de Oliveira e ao pesquisador Camilo de Lelis Teixeira de Andrade, pelas indispensáveis críticas e sugestões.

Aos funcionários da Universidade Federal de Viçosa que souberam distintamente acatar as principais necessidades deste trabalho.

Aos meus pais Ivonilzo (in memorian) e Conceição, por me forçarem a ficar distante quando eu mais queria estar perto.

À minha esposa Roberta Magna, pelo amor, paciência e carinho demonstrados durante toda essa jornada.

Ao meu filho João Victor, por todos os momentos em que não pude me dedicar completamente, pelo seu sorriso e pelo orgulho de ser seu pai.

Aos meus irmãos Marcelo e Rafael, pelo apoio e união nas horas mais difíceis. À Marcelo, pelo auxílio nos ensaios experimentais.

Ao Pós-graduando e amigo Sérgio Braz, pela colaboração nas análises de nitrato.

Aos colegas de curso de pós-graduação pela amizade, apoio e sugestões recebidas durante o decorrer do Doutorado. Um carinho especial aos eternos amigos Carlos Rodrigues Pereira (Papagaio), Paulo Sérgio Lourenço de Freitas (Xelexéu) e Luís de França Camboim Neto (Mr. Camboim).

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pela concessão da bolsa de estudos.

À Universidade Estadual do Oeste do Paraná, pelo apoio e à Universidade Federal de Viçosa, pela acolhida e ensinamentos, o que tornou possível a realização deste trabalho.

BIOGRAFIA

MARCUS METRI CORRÊA, filho de Ivonilzo Corrêa da Silva e Conceição de Maria Metri Corrêa, nasceu na cidade de João Pessoa, PB, no dia 28 de abril de 1968.

Em março de 1988, iniciou o Curso de Graduação em Agronomia na Universidade Federal Rural de Pernambuco, em Recife, PE, graduando-se em março de 1993.

Em março de 1994, iniciou o Curso de Mestrado em Engenharia Agrícola, concentrando seus estudos em Irrigação e Drenagem, na Universidade Federal de Lavras, em Lavras, MG.

Em outubro de 1996, iniciou o Curso de Doutorado em Engenharia Agrícola, novamente na área de concentração de Irrigação e Drenagem.

Em fevereiro de 2000 foi contratado como Professor Assistente, na Universidade Estadual do Oeste do Paraná, para lecionar as disciplinas de Drenagem Agrícola e Projetos de Irrigação e Drenagem

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Definição	Unidade
ϕ	potencial total da água no solo	L
ρ	Massa específica da água do solo	$M L^{-3}$
η	viscosidade dinâmica da água do solo	$M L^{-1} T^{-1}$
θ	umidade volumétrica do solo	$L^3 L^{-3}$
λ	parâmetro do modelo Brooks e Corey	
τ	fator de tortuosidade	
γ	dispersividade do solo	L
v	velocidade da solução no poro	$L T^{-1}$
Γ	extração de solutos pelas plantas	$M L^{-3} T^{-1}$
α, n, m	parâmetros do modelo van Genuchten	
ρ_g	massa específica do solo	$M L^{-3}$
θ_r	umidade residual	$L^3 L^{-3}$
θ_s	umidade de saturação	$L^3 L^{-3}$
A	área foliar por planta	L^2
a^*, n^*	parâmetros da isoterma de adsorção	
a, b	parâmetros empíricos da função densidade de raíz	
A_0	área foliar máxima por planta	L^2

b^*	adsorção máxima do soluto no solo	$M M^{-1}$
C	concentração do soluto na fase líquida do solo	$M L^{-3}$
C_0	concentração do soluto aplicada	$M L^{-3}$
C_a	concentração do soluto fora da região de estudo	$M L^{-3}$
C_i	concentração inicial	$M L^{-3}$
D	coeficiente de dispersão hidrodinâmica	$L^2 T^{-1}$
D_0	coeficiente de difusão molecular em água pura	$L^2 T^{-1}$
d_{50}	diâmetro médio das partículas do solo	L
D_h	coeficiente de dispersão	$L^2 T^{-1}$
D_m	coeficiente de difusão molecular no solo	$L^2 T^{-1}$
$E(h)$	capacidade hídrica específica	L^{-1}
E_p	evaporação potencial no solo	$L T^{-1}$
E_r	evaporação real no solo	$L T^{-1}$
ET_0	evapotranspiração de referência	$L T^{-1}$
ET_p	evapotranspiração potencial da cultura	$L T^{-1}$
ET_r	evapotranspiração real da cultura	$L T^{-1}$
$F(z, t, h)$	fator empírico da função extratora	
h	potencial matricial do solo	L
h_a	potencial matricial fora da região de estudo	L
h_b	potencial de entrada de ar	L
IAF	índice de área foliar	$L^2 L^{-2}$
J_D	fluxo dispersivo	$M L^{-2} T^{-1}$
J_h	fluxo dispersivo	$M L^{-2} T^{-1}$
J_m	fluxo convectivo	$M L^{-2} T^{-1}$
$K(h)$	condutividade hidráulica não saturada do solo	$L T^{-1}$
k, B	parâmetros empíricos da área foliar	
K_0	condutividade hidráulica saturada do solo	$L T^{-1}$
K_c	coeficiente da cultura	
K_d	coeficiente de partição ou distribuição	$L^3 M^{-1}$
K_s	coeficiente para cálculo da ET_r	
L_a	lâmina atual de água no solo	L
L_t	lâmina total de água no solo	L

PP	densidade de plantio	Planta L ⁻²
q	fluxo	L T ⁻¹
q _x , q _y , q _z	fluxos nas direções x, y e z, respectivamente	L T ⁻¹
R	extração de água pelas plantas	T ⁻¹
R(z,t)	função densidade de raízes	M L ⁻³
RD _m	profundidade máxima do sistema radicular	L
RD _o	profundidade de plantio	L
Re	número de Reynolds	
S	concentração do soluto na fase sólida do solo	M M ⁻¹
S _e	saturação efetiva	L ³ L ⁻³
t	coordenada temporal	T
t ₀	tempo de aplicação	T
t _m	tempo para as raízes atingirem a profundidade máxima	T
T _p	transpiração potencial da cultura	L T ⁻¹
T _r	transpiração real da cultura	L T ⁻¹
TTA	tempo térmico acumulado	°C
z	coordenada de posição vertical	L

ÍNDICE

	Página
LISTA DE SÍMBOLOS.....	vi
RESUMO	xi
ABSTRACT	xiii
1. INTRODUÇÃO	01
2. REVISÃO DE LITERATURA	04
2.1 Dinâmica da Água no Solo.....	04
2.1.1 Equação do transporte de água.....	05
2.1.2 Curva característica de retenção de água no solo.....	10
2.1.3 Condutividade hidráulica do solo não saturado.....	13
2.2 Dinâmica de Solutos no Solo.....	14
2.2.1 Equação do transporte de solutos.....	14
2.2.2 Retenção de solutos no solo.....	19
2.3 Extração de Água e Solutos pelas Plantas.....	21
2.3.1 Evaporação no solo e transpiração das plantas.....	21
2.3.2 Função extratora.....	23
2.4 Modelos de transporte de água e solutos no solo.....	25
3. MATERIAL E MÉTODOS	27
3.1 Desenvolvimento Matemático do Modelo.....	27
3.1.1 Região física estudada.....	27

3.1.2	Equação do movimento de água no solo.....	28
3.1.3	Equação do movimento de soluto no solo.....	40
3.1.4	Desenvolvimento do programa computacional.....	46
3.2	Procedimento Experimental.....	52
3.2.1	Características do material solo.....	52
3.2.2	Transporte de nitrato em colunas de solo.....	53
3.2.3	Crescimento e densidade radicular da cultura.....	56
3.3	Teste do Modelo SIMASS-C.....	57
4.	RESULTADOS E DISCUSSÃO	58
4.1	Apresentação do Modelo SIMASS-C.....	58
4.2	Teste do Modelo SIMASS-C com colunas de solo.....	74
4.3	Sensibilidade do Modelo SIMASS-C à variação de K_d	83
4.4	Análise Comparativa do Modelo SIMASS-C com o Modelo CXTFIT.....	89
5.	RESUMO E CONCLUSÕES	93
6.	RECOMENDAÇÕES.....	96
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	97

RESUMO

CORRÊA, Marcus Metri, D.S., Universidade Federal de Viçosa, dezembro de 2001. **Desenvolvimento e teste de modelo de transporte unidimensional de solutos no solo.** Orientador: Professor Mauro Aparecido Martinez. Conselheiros: Professores Hugo Alberto Ruiz e Luiz Cláudio Costa.

Um modelo realístico determinístico dinâmico foi desenvolvido para simular o transporte unidimensional de água e solutos no solo sob condições de escoamento não permanente e considerando a presença do sistema radicular da cultura. A equação de Richards, que permite obter a distribuição do potencial matricial, e a equação do transporte dispersivo-convectivo, que descreve a mobilidade de solutos no solo, foram resolvidas numericamente pelo método de diferenças finitas. Após o desenvolvimento matemático, implementou-se um programa computacional denominado SIMASS-C (**S**imulação do **M**ovimento de **Á**gua e **S**oluto no **S**olo considerando a presença de **C**ultura). O modelo foi analisado inicialmente por meio da realização de simulações de diferentes problemas, quando verificou-se que os resultados gerados pelo modelo eram compatíveis com a realidade física dos problemas simulados. Posteriormente, o desempenho do modelo foi testado usando dados obtidos em ensaios experimentais conduzidos em colunas de solo, em

ambiente protegido, nas quais sementes de milho foram semeadas. Após o plantio, foram realizadas irrigações e aplicações de KNO_3 . Os resultados obtidos demonstraram que o modelo SIMASS-C descreveu eficientemente o transporte de água e soluto no solo, sob condições não saturadas, uma vez que os perfis de umidade do solo e de concentração do ion nitrato simulados pelo SIMASS-C ficaram dentro da faixa de variação da umidade e concentração de nitrato determinadas experimentalmente. Simulações adicionais, usando-se resultados de pesquisa obtidos por CORRÊA (1996) com o inseticida aldicarbe, permitiram verificar que o modelo SIMASS-C apresentou um bom desempenho quando comparado ao modelo CXTFIT. As curvas de eluição geradas pelos dois modelos apresentaram-se bem próximas em todos os cenários analisados. Foi possível, também, testar a sensibilidade do modelo SIMASS-C ao coeficiente de partição do produto no solo (K_d) demonstrando ser este coeficiente um importante parâmetro em estudos de transporte de solutos no solo, principalmente em condições de umidade acima da capacidade de campo do solo.

ABSTRACT

CORRÊA, Marcus Metri, D.S., Universidade Federal de Viçosa, december of 2001. **Development and test of an one-dimensional model for solute transport in the soil** . Adviser: Mauro Aparecido Martinez. Committee Members:: Hugo Alberto Ruiz and Luiz Cláudio Costa.

A mathematical model was developed to simulate the of water and solute transport in the soil under transient conditions and considering the root intake. The Richards' equation and the dispersive-convective transport equation were solved numerically using the finite difference method. After the mathematical development, a software denominated SIMASS-C was implemented (**S**imulation of the **M**ovement of **w**ater and **S**olute in the **S**oil considering the presence of **C**ulture). Initially, the model was analyzed by perfoming the simulations for different problems, which allow to verify that the results generated by the model were compatible with the physical reality of the simulate problems. Later on, the model was tested by using data obtained from assays in soil columns under protected environment, where the maize seeds were sowed. After planting, the irrigations were applied as well as the KNO_3 . The results obtained show that the model SIMASS-C described efficiently the transport of water and solute in the soil, under unsaturated conditions, since that the profiles of water content of the soil and concentration of the ion nitrate

simulated by the model were within the interval of the data observed experimentally. Additional simulations, based on research results obtained in the literature with the insecticide aldicarb, allowed to verify that the model SIMASS-C had a good performance when compared to the model CXTFIT. The Breakthrough curves generated by the two models came very close in all the analyzed problems. It was possible, also, to verify the sensibility of the model SIMASS-C to the coefficient of partition (K_d) of the product in the soil. This coefficient was shown to be an important parameter in studies on soil solute transport, mainly under a moisture level above the soil field capacity.

1 INTRODUÇÃO

Sabe-se que a sociedade moderna, caracterizada pela sua alta capacidade de consumo, necessita de um parque agro-industrial gerador de enorme quantidade de bens alimentícios. Nesse contexto, a atual intensificação do uso das terras vem desempenhando um importante papel, uma vez que vem permitindo um significativo aumento na produção agrícola mundial.

Essa intensificação, no entanto, tem despertado grande preocupação devido, principalmente, aos impactos que vem causando ao meio ambiente, sobretudo no que diz respeito à sua contaminação por substâncias químicas. Nesse contexto, o estudo do transporte de água e solutos no solo, visando estabelecer estratégias de manejo e prevenção da contaminação ambiental, é um tema que tem se destacado no meio científico nos últimos anos.

Aplicados com o objetivo de aumentar a produtividade, os fertilizantes e defensivos agrícolas interagem com o solo por meio de diversos processos. Uma vez transportados pela água da chuva ou irrigação, esses produtos químicos podem alcançar regiões não exploradas pelo sistema radicular das culturas, diminuindo sua eficiência e aumentando os riscos de contaminação da água subterrânea, que constitui-se em importante fonte de água limpa para a humanidade.

Problemas de contaminação estão ocorrendo em propriedades rurais onde os fertilizantes e defensivos agrícolas estão sendo utilizados

intensivamente. Agências governamentais e instituições de pesquisa de vários países têm conduzido estudos e investigações de campo onde foram registrados níveis de concentrações de resíduos químicos, acima do permitido, nesse ecossistema.

A Agência de Proteção do Meio Ambiente dos Estados Unidos (U.S. Environmental Protection Agency) relatou recentemente que pelo menos 46 diferentes tipos de pesticidas têm sido detectados nas análises de água subterrânea em 26 Estados do País como resultado do emprego de práticas agrícolas. Quanto aos fertilizantes, segundo a mesma entidade, as atenções estão voltadas principalmente para as contaminações que tem sido observadas com o fertilizante nitrato (NO_3^-), o qual foi detectado em aproximadamente 60% das amostras de água analisadas.

No Brasil, infelizmente faltam dados que indiquem o grau de poluição das águas subterrâneas provocado pelo uso dessas substâncias químicas. O alto custo, tempo e esforço humano envolvido nesses estudos inviabilizam pesquisas nessa área. No entanto, em Minas Gerais, RIGITANO e GOUVEIA (1995) encontraram traços do inseticida Aldicarbe, defensivo do grupo dos carbamatos, em fontes superficiais de abastecimento de água localizadas próximas de cultivos de batata. BONATO et al. (1999), analisando 250 amostras de água superficial e subterrânea, verificaram a presença do herbicida tebuthiuron, usado em cana de açúcar, na região da Bacia do Espirado, Ribeirão Preto, SP.

Para avaliar o risco de contaminação, a modelagem do transporte de água e solutos no solo é considerada uma importante ferramenta por permitir compreender as formas de reduzir a poluição das águas subterrâneas. A possibilidade de se prever o movimento de solutos no solo, por meio de modelos numéricos, permite uma extraordinária economia de tempo e recursos financeiros, os quais seriam gastos em estudos experimentais.

Os avanços computacionais aliados aos métodos numéricos têm permitido o desenvolvimento de modelos de transporte de solutos no solo, levando a um melhor entendimento dos processos naturais que governam o transporte dessas substância químicas. Deve-se ressaltar ainda que a flexibilidade em efetuar alterações nas condições de contorno e considerar a variabilidade espacial e temporal do solo, permite simular alternativas de

manejo que visem minimizar os riscos de contaminação do sistema, bem como definir estratégias para otimizar o uso de água e solutos, reduzindo os custos de produção.

Como exemplos de modelos matemáticos avançados que utilizam técnicas numéricas, pode-se citar o modelo WAVE (**W**ater and **A**grochemicals in soil, crop and **V**adose **E**nvironment), desenvolvido por VANCLOOSTER et al. (1994) e o HYDRUS, desenvolvido por VOGEL et al. (1995). Esses modelos além de considerar o transporte dinâmico de substâncias química no solo, incluindo os processos de transformações, consideram ainda a presença de um sistema radicular ativo, o que promove, conseqüentemente, resultados de simulação mais realísticos.

O Brasil começou, recentemente, a atuar nesse campo de pesquisa. Os trabalhos desenvolvidos por COSTA (1998) e OLIVEIRA et al. (2000) buscaram desenvolver modelos capazes de prever o transporte de água e solutos no solo. Verifica-se, no entanto, que os modelos desenvolvidos pelos autores não contemplaram, pelo menos de modo satisfatório, o transporte de água e solutos em condições não saturadas.

Diante do exposto o presente trabalho teve como objetivo:

- Desenvolver um modelo matemático computacional capaz de calcular a distribuição da umidade e da concentração de solutos no perfil do solo sob condições de escoamento não saturado e considerando a presença de sistema radicular ativo.
- Testar o modelo desenvolvido, comparando os resultados obtidos por simulação com àqueles obtidos em ensaios experimentais em coluna de solo.

2 REVISÃO DE LITERATURA

O transporte de substâncias químicas através do perfil do solo tem recebido atenção especial por cientistas já há vários anos. Recentemente, publicações que consideraram o poder poluente destas substâncias ao meio ambiente e subseqüente efeitos sobre as plantas, animais e seres humanos, aumentaram o interesse público sobre este assunto. Com a atenção voltada para os riscos de contaminação dos recursos hídricos, aumentou-se a pressão da sociedade para o entendimento dos processos de transporte que controlam o destino dos poluentes no solo (PORRO et al., 1993).

2.1 Dinâmica da Água no Solo

Independente do modo de aplicação, todo produto químico utilizado na agricultura eventualmente alcança o solo, onde processos de natureza física, química e biológica determinarão se o produto permanecerá adsorvido na camada agricultável do solo ou se moverá pelo seu perfil até atingir camadas mais profundas GISH et al. (1991). Dentro deste contexto, e considerando o importante papel que a água exerce nos processos físicos, químicos e biológicos do solo, o transporte de qualquer soluto deve ser analisado simultaneamente com o transporte de água.

2.1.1 Equação do transporte de água

O solo, como um sistema trifásico, apresenta uma extensa variedade de poros e canais por onde a água pode escoar. A geometria exata dessas aberturas ainda é desconhecida, obrigando a definição de uma visão macroscópica do processo de escoamento de água (JURY et al. 1991). Com essa concepção macroscópica, o solo passa a ser considerado um meio poroso contínuo, no qual se admite que qualquer característica do solo pode ser quantificada experimentalmente ou expressas por meio de funções matemáticas contínuas.

De acordo com BEAR (1979), o primeiro passo para a passagem do nível microscópico para o macroscópico, é a definição do volume elementar representativo (VER) para um dado meio poroso. O VER representa um volume de solo grande o suficiente para integrar as variações microscópicas do meio poroso, de forma que estas variações não alterem as condições médias do meio; mas que ao mesmo tempo seja pequeno o suficiente para descrever as variações macroscópicas requisitadas pelo modelo.

O primeiro pesquisador a adotar uma visão macroscópica do escoamento de água no solo foi o físico hidráulico Henry Darcy, em 1856. Após uma série de experimentos em colunas de areia, na vertical, sob condições saturadas, Darcy chegou a seguinte equação, denominada mundialmente como a lei de Darcy (HILLEL, 1982; PIZARRO, 1985; BOS, 1994 e LIBARDI, 1995).

$$q = -K_0 \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad [2.1]$$

em que:

q – fluxo (LT^{-1});

K_0 – condutividade hidráulica do solo saturado ($L T^{-1}$);

ϕ – potencial total da água no solo (L);

z – coordenada de posição vertical, sendo positiva para cima (L).

Inúmeros trabalhos têm investigado a validade da equação de Darcy para o escoamento de água em meio saturado. De acordo com HILLEL (1971)

e BOS (1994), a linearidade entre o fluxo e o gradiente de potencial é válida somente enquanto o escoamento da água no solo for caracterizado como laminar. Como critério de classificação, pode-se afirmar que o escoamento se encontra em regime laminar quando o número de Reynolds for igual ou inferior à unidade. Em escoamento de água em meio poroso, o número de Reynolds pode ser calculado por (BOS, 1994):

$$Re = \frac{q d_{50} \rho}{\eta} \quad [2.2]$$

em que:

Re – número de Reynold (adimensional);

d_{50} – diâmetro médio das partículas do solo (L);

ρ – densidade da água do solo ($M L^{-3}$);

η – viscosidade dinâmica da água do solo ($M L^{-1} T^{-1}$).

A equação de Darcy, como vista anteriormente, foi desenvolvida para condição de solo saturado. Embora o estudo da dinâmica da água em solo saturado seja importante, os solos geralmente não se encontram nessa condição.

Em 1907, Edgar Buckingham propôs uma modificação na lei de Darcy para descrever o escoamento de água em solo não saturado. As modificações de Buckingham estão fundamentadas em duas suposições (JURY et al., 1991):

- 1) A condutividade hidráulica do solo não saturado apresenta relação funcional com a umidade ou com o potencial matricial.
- 2) O potencial total da água no solo, em condições isotérmica e não saturada, é composto pela soma dos potenciais matricial e gravitacional.

A equação resultante, denominada de equação de Darcy-Buckingham, pode ser expressa na direção vertical como:

$$q = -K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \quad [2.3]$$

em que:

h – potencial matricial do solo (L);

$K(h)$ – condutividade hidráulica do solo não saturado ($L T^{-1}$).

MILLER e LOW (1963) encontraram evidências de que a equação de Darcy-Buckingham não é válida para solos submetidos a condições de gradientes de potenciais muito baixos. ENFIELD e YATES (1990) e RIGHETTO (1998) consideram que a razão provável para esse desvio está relacionada às forças de adsorção entre a molécula de água e a partícula do solo. Em condições de gradiente muito baixo, a ação da força adsortiva pode oferecer maior resistência ao movimento da água no solo, fazendo com que a água passe a apresentar algumas propriedades de fluido não-Newtoniano.

Embora muito interessante sob o ponto de vista teórico, a limitação mencionada apresenta pouco valor prático. REICHARDT (1996) ressalta que, apesar de suas limitações, a equação de Darcy-Buckingham é a equação que melhor descreve o fluxo de água no solo.

Considerações adicionais devem ser feitas sobre o grau de dependência da equação de Darcy-Buckingham com a umidade do solo. A falta de modelos funcionais que incluam o fenômeno de histerese na curva de retenção de umidade do solo faz com que, na maioria dos casos, a equação de Darcy-Buckingham seja utilizada inadequadamente. Como conseqüência, falhas podem ser obtidas na determinação do fluxo de água no solo (HILLEL, 1982 e ENFIELD e YATES, 1990). Entende-se por histerese o fenômeno no qual a relação entre o potencial matricial e umidade deixa de ser unívoca, apresentando pares de valores distintos para o processo de umedecimento e secagem do solo. A histerese é atribuída à geometria irregular dos poros, ao ar aprisionado na matriz do solo e às características de expansão e contração das argilas durante a secagem e umedecimento do solo (IWATA et al., 1995; JURY et al., 1991; REICHARDT, 1996, VANCLOOSTER et al., 1996).

MONTENEGRO (1997), no entanto, enfatiza que para a análise de problemas práticos é mais importante considerar a variabilidade espacial das propriedades hidráulicas do solo do que incluir o efeito da histerese.

Apenas o conhecimento do fluxo pela equação de Darcy-Buckingham não é suficiente em estudos de dinâmica da água no solo. Nesses estudos, é necessária uma equação que descreva, dentro do perfil do solo, como a umidade varia com o tempo. A equação da continuidade permite estabelecer essa relação.

Na literatura estão disponíveis um grande número de trabalhos que apresentam o desenvolvimento matemático da equação da continuidade para o transporte de água no solo. Partindo-se de um volume elementar de solo, JURY et al. (1991), LIBARDI (1995), PREVEDELLO (1996), REICHARDT (1996) apresentaram a seguinte equação:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \left[\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z} \right] \quad [2.4]$$

em que:

θ – umidade volumétrica do solo ($L^3 L^{-3}$);

t – coordenada temporal (T);

q_x, q_y, q_z – fluxos nas direções x, y e z, respectivamente ($L T^{-1}$).

Considerando o movimento de água apenas na direção vertical, a equação (2.4) pode ser simplificada para:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial q_z}{\partial z} \quad [2.5]$$

a qual é interpretada considerando que, se num instante “t” e profundidade “z” do solo houver uma variação no fluxo com respeito a direção vertical então, necessariamente, nessa profundidade, estará havendo uma variação na umidade com o tempo e que essas taxas de variação são numericamente iguais.

A equação da continuidade (equação 2.5) combinada com a equação de Darcy-Buckingham (equação 2.3), resulta na clássica equação diferencial que descreve o movimento de água no solo, conhecida como equação de Richards:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad [2.6]$$

É fácil perceber que a equação de Richards, no formato apresentado, não pode ser matematicamente resolvida, uma vez que contém duas incógnitas, “ θ ” e “ h ”. Esta limitação pode ser contornada acrescentando-se o termo capacidade hídrica específica, que representa a variação da umidade com o potencial matricial e pode ser determinada pela declividade da curva de retenção de água no solo.

$$E(h) = \frac{\partial \theta}{\partial h} \quad [2.7]$$

em que:

$E(h)$ – capacidade hídrica específica (L^{-1}).

Introduzindo o termo capacidade hídrica específica na equação (2.6), temos:

$$E(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad [2.8]$$

De acordo com VANCLOOSTER et al. (1994), a equação (2.8) é aplicável tanto para condição de escoamento saturado como não saturado.

Atenção especial deve ser dada, no entanto, ao valor da capacidade hídrica específica em solos saturados. Analisando o formato predominante das curvas de retenção, percebe-se que quando o solo torna-se saturado, $E(h)$ torna-se zero. Entretanto, quando se faz uso de métodos numéricos, para resolver, simultaneamente, a equação (2.8) para um meio contendo solo saturado e não saturado, deve-se assumir, para regiões saturadas, valor diferente de zero. MARTINEZ (1989), trabalhando com a técnica numérica de elementos finitos, obteve bons resultados em suas simulações utilizando um valor de $E(h)$ igual à 10^{-5} . Adicionalmente, ROGERS (1994), resolvendo numericamente a equação de Richards, verificou que os valores mais adequados para $E(h)$, em solos saturados, devem estar na faixa de 10^{-7} a 10^{-3} .

Para completar a descrição matemática do transporte de água é necessário especificar as condições iniciais e de contorno que regem o seu destino no solo. Portanto, é necessário adicionar equações auxiliares que especifiquem essas condições na região física de estudo. A apropriada formulação destas equações, segundo van GENUCHTEN e PARKER (1984), representa uma fase crítica para a correta interpretação dos resultados obtidos em estudo de transporte.

Na revisão realizada, há um certo consenso na representação matemática das condições inicial e de contorno que regem o transporte de água no solo. Como exemplo, pode-se citar os trabalhos de JURY et al. (1976), SELIM e ISKANDAR (1981), VANCLOOSTER et al. (1994), VOGEL et al. (1996) e COSTA (1998).

Representando o perfil do solo estudado por “P”, a distribuição de potencial matricial inicial é representada por meio da seguinte equação:

$$h(z,0) = h(z)_{\text{inicial}} \quad \text{para } t = 0 \text{ e } 0 \leq z \leq P \quad [2.9]$$

As condições de contorno são do tipo Dirichlet ou tipo Neumann, quando os valores do potencial matricial e fluxo forem, respectivamente, especificados nos contornos da região física estudada. As condições de contorno são expressas pelas seguintes equações:

$$h(z,t) = h_z \quad \text{para } t > 0 \text{ e } z = 0 \text{ ou } z = P \quad [2.10]$$

$$q_z(z,t) = -K(h) \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad \text{para } t > 0 \text{ e } z = 0 \text{ ou } z = P \quad [2.11]$$

2.1.2 Curva característica de retenção de água no solo

A solução da equação de Richards está condicionada à especificação de modelos funcionais que estabeleçam as relações $\theta = \theta(h)$ e $K = K(h)$. Vários modelos têm sido reportados na literatura, os quais permitem a estimativa da curva de retenção de água ($\theta = \theta(h)$) a partir de equações analíticas

(ALEXANDER e SKAGSS, 1986). Os modelos de van Genuchten (van GENUCHTEN, 1980) e de Brooks e Corey (COSTA, 1998) são largamente empregados no estudo da dinâmica da água do solo.

A partir de um grande número de experimentos, em 1964, Brooks e Corey obtiveram uma equação geral que relaciona o potencial matricial e a umidade do solo, expressa por:

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left(\frac{h_b}{h} \right)^\lambda \quad \text{para } h < h_b$$

[2.12]

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = 1 \quad \text{para } h \geq h_b$$

em que:

S_e – saturação efetiva ($L^3 L^{-3}$);

θ_r – umidade residual ($L^3 L^{-3}$);

θ_s – umidade de saturação ($L^3 L^{-3}$);

h_b – potencial matricial de entrada de ar (L);

λ – parâmetro de ajuste do modelo, relacionado à geometria do solo (adimensional).

Os autores definiram potencial de entrada de ar como o valor do potencial matricial em que, a partir do solo saturado, dá-se início à entrada de ar nos poros maiores do solo.

Para vários tipos de solo, verifica-se que a expressão de Brooks e Corey se ajusta bem aos valores experimentais, porém, se restringem a potenciais matriciais superiores à -200 cm (RIGHETTO, 1998). Essa limitação está relacionada a descontinuidade apresentada pelo modelo quando o potencial matricial assume valores igual ou superiores ao potencial de entrada de ar (DAAMEN et al, 1990).

A capacidade hídrica específica é determinada, partindo-se da equação (2.12), por:

$$E(h) = -\frac{\lambda(\theta_s - \theta_r)\left(\frac{h_b}{h}\right)^\lambda}{h} \quad [2.13]$$

De acordo com MONTENEGRO (1997), o modelo de van Genuchten é considerado o mais bem aceito para representar a curva de retenção de água dos solos. A equação proposta por van Genuchten pode ser descrita por:

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \frac{1}{\left(1 + |\alpha h|^n\right)^m} \quad \text{para } h < 0 \quad [2.14]$$

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = 1 \quad \text{para } h \geq 0$$

em que:

α , n , m – parâmetros de ajuste do modelo, relacionados com as características físico-hídricas do solo.

Semelhante ao procedimento adotado no modelo de Brooks e Corey e considerando a restrição de MUALEM (1976), na qual $m = 1 - (1/n)$, a capacidade hídrica específica é determinada utilizando-se a equação abaixo:

$$E(h) = \frac{(1-n)(\theta_s - \theta_r)\left[1 + (\alpha|h|^n)\right]^{1/n-2} (\alpha|h|^n)^n}{h} \quad [2.15]$$

VANCLOOSTER et al. (1994) e VOGEL et al. (1995) representaram o parâmetro “ α ” como sendo igual ao inverso do potencial de entrada de ar. Neste caso temos:

$$\alpha = \frac{1}{|h_b|} \quad [2.16]$$

A equivalência entre os parâmetros dos modelos de Brooks e Corey e van Genuchten foi também observada por outros pesquisadores. Como

exemplo, podem-se citar os trabalhos de RUSSO et al. (1991) e RAGAB e COOPER (1993), nos quais as relações entre os demais parâmetros dos modelos são representadas pelas equações abaixo:

$$n = \lambda + 1 \quad [2.17]$$

$$m = \frac{\lambda}{n} \quad [2.18]$$

2.1.3 Condutividade hidráulica do solo não saturado

A condutividade hidráulica é uma característica hidrodinâmica do solo e como tal depende da geometria do espaço poroso e das propriedades do fluido. De acordo com MONTENEGRO (1997), os primeiros estudos com modelos de condutividade hidráulica foram realizados por Collis e George, em 1950. Ao longo dos anos, a teoria original foi modificada, dando origem a várias equações que relacionam a condutividade hidráulica com as características da matriz do solo. Dentre os modelos desenvolvidos destacam-se os modelos de Brooks e Corey e van Genuchten, os quais permitem estimar a condutividade hidráulica a partir da curva de retenção de água.

O modelo apresentado por Brooks e Corey pode ser representado pela seguinte equação:

$$K(h) = K_0 \left(\frac{h_b}{h} \right)^{(2+3\lambda)} \quad \text{para } h < h_b$$
$$K(h) = K_0 \quad \text{para } h \geq h_b$$

[2.19]

Semelhante ao modelo proposto por Brooks e Corey para a curva de retenção de água do solo, a curva $K(h)$ pode tornar-se descontínua quando o potencial matricial assumir valores iguais ou superiores ao potencial de entrada de ar.

Baseando-se no trabalho de MUALEM (1976), que apresenta uma descrição matemática da distribuição do tamanho de poros do solo, van GENUCHTEN (1980) desenvolveu a equação mais utilizada para a estimativa da condutividade hidráulica do solo não saturado.

$$K(S_e) = K_0 S_e^{0.5} \left[1 - (1 - S_e^{1/m})^m \right]^2 \quad [2.20]$$

VANCLOOSTER et al. (1994) considera o modelo de van Genuchten teoricamente bem elaborado. Na prática, no entanto, os autores relatam que o modelo é altamente sensível ao valor da condutividade hidráulica saturada, o que pode promover estimativas irreais na curva da condutividade quando “ K_0 ” for inadequadamente determinado.

2.2 Dinâmica de Solutos no Solo

2.2.1 Equação do transporte de solutos

Os processos físicos, químicos e biológicos que definem o destino de qualquer soluto no solo já são conhecidos e podem ser quantificados. Neste contexto, vários modelos matemáticos foram desenvolvidos, nos últimos anos, com o intuito de avaliar e compreender quais procedimentos devem ser adotados para manter o nível ótimo de fertilizantes e defensivos agrícolas no solo, sem contaminar as águas subterrâneas (TORIDE et al., 1995).

De acordo com LEIJ et al. (1991), a maioria dos modelos matemáticos desenvolvidos descreve o transporte de solutos no solo deterministicamente através da equação do transporte convectivo-dispersivo, na qual o transporte de qualquer soluto no solo é dividido em três componentes básicas: convecção, difusão e dispersão.

O transporte convectivo, também denominado como fluxo de massa, refere-se ao movimento passivo do soluto com a água. Na direção vertical, o transporte convectivo do soluto pode ser descrito por:

$$J_m = q_z C \quad [2.21]$$

em que:

J_m – fluxo convectivo ($M L^{-2} T^{-1}$);

C – concentração do soluto na fase líquida do solo ($M L^{-3}$).

A difusão é um processo espontâneo resultante do movimento natural de moléculas e íons em solução e é proporcionado por gradientes de concentração. Assim, na direção vertical, o movimento por difusão pode ser descrito por:

$$J_D = -\theta D_m \frac{\partial C}{\partial z} \quad [2.22]$$

em que:

J_D – fluxo dispersivo ($M L^{-2} T^{-1}$);

D_m – coeficiente de difusão molecular no solo ($L^2 T^{-1}$).

O coeficiente de difusão molecular no solo é determinado, considerando a tortuosidade do meio poroso e a difusão molecular do produto químico em água.

$$D_m = \tau D_0 \quad [2.23]$$

em que:

τ – fator de tortuosidade (adimensional);

D_0 – coeficiente de difusão molecular em água pura ($L^2 T^{-1}$).

O transporte de qualquer substância química por dispersão ocorre como consequência de variações do fluxo nos poros do solo. Em nível microscópico, há uma distribuição de velocidades nos poros devido à resistência friccional causada pelas superfícies sólidas do material poroso, bem como pelo avanço diferenciado da frente de molhamento. Esta distribuição é semelhante à distribuição de velocidade encontrada nas seções de tubulações de condutos forçados e proporciona a movimentação do soluto sob diferentes taxas o que conduz a um processo de mistura que é macroscopicamente semelhante à

mistura provocada pelo processo de difusão (van GENUCHTEN e WIERENGA, 1986). Porém, ao contrário da difusão química que acontece mesmo sem fluxo, a dispersão ocorre somente com o movimento da água. Experimentos de campo e de laboratório demonstram que o transporte por dispersão na direção vertical pode ser escrito como:

$$J_h = -\theta D_h \frac{\partial C}{\partial z} \quad [2.24]$$

em que:

J_h – fluxo dispersivo ($M L^{-2} T^{-1}$);

D_h – coeficiente de dispersão ($L^2 T^{-1}$).

Geralmente assume-se que o coeficiente de dispersão aumenta com o aumento da velocidade da solução no poro.

$$D_h = \gamma v^g \quad [2.25]$$

em que:

γ – dispersividade do solo (L);

v – velocidade da solução no poro ($L T^{-1}$).

O expoente “g” da equação (2.25) é um parâmetro empírico, assumindo normalmente o valor unitário (van GENUCHTEN e WIERENGA, 1986).

Dada a similaridade entre dispersão e difusão, os coeficientes “ D_h ” e “ D_m ” são freqüentemente considerados aditivos e ao resultado dá-se o nome de coeficiente de dispersão hidrodinâmica (BEAR, 1979).

$$D = D_m + D_h \quad [2.26]$$

em que:

D – coeficiente de dispersão hidrodinâmica ($L^2 T^{-1}$).

Fazendo o somatório das equações (2.21), (2.22), (2.24) e (2.26), obtém-se a equação para o fluxo de solutos no solo, na direção vertical.

$$J_s = -\theta D \frac{\partial C}{\partial z} + qC \quad [2.27]$$

em que:

J_s – fluxo de solutos no solo ($M L^{-2} T^{-1}$).

O balanço de solutos no solo, em uma dimensão, é regido pela equação da continuidade (van GENUCHTEN e WIERENGA, 1986), ou seja:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta C + \rho_g S) = - \frac{\partial J_s}{\partial z} \quad [2.28]$$

em que:

S – concentração do soluto adsorvida na fase sólida do solo ($M M^{-1}$);

ρ_g – massa específica do solo ($M L^{-3}$).

Substituindo a equação (2.27) na equação (2.28) resulta a equação para o transporte de solutos no solo.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta C + \rho_g S) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} - q_z C \right) \quad [2.29]$$

Os dois termos do lado esquerdo da equação, situados entre parênteses, referem-se, respectivamente, às mudanças, no tempo, nas concentrações dos solutos associadas às fases líquida e sólida do solo.

Segundo BUTTERS e JURY (1989), a equação (2.29) nem sempre tem tido sucesso em quantificar precisamente o transporte de solutos devido a uma série de problemas, entre eles: heterogeneidade do solo, fluxo preferencial, descrição imprópria das condições de contorno e deficiência na definição dos parâmetros envolvidos. Entretanto, vários autores têm realizado experimentos, seja em campo ou laboratório, e obtidos excelentes resultados entre os dados observados e os valores teóricos obtidos pela equação (NASCIMENTO FILHO et al., 1979; JARDINE et al., 1988; JACOBSEN et al., 1992 e TSUBOYAMA et al., 1994).

A condição inicial para o transporte de solutos é matematicamente

descrita na forma:

$$C(z,0) = C_i(z) \quad \text{para } t = 0 \text{ e } 0 \leq z \leq P \quad [2.30]$$

em que:

$C_i(z)$ – concentração inicial ($M L^{-3}$).

No entanto, na maioria dos casos, a condição inicial utilizada nos modelos de transporte de solutos considera a concentração do produto como constante ao longo do perfil do solo:

$$C(z,0) = C_i \quad \text{para } t = 0 \text{ e } 0 \leq z \leq P \quad [2.31]$$

A formulação apropriada para a condição de contorno na superfície do solo tem sido objeto de consideráveis discussões. No entanto, a maioria dos trabalhos envolvendo estudos de deslocamento miscível no solo têm apresentado a condição de contorno do terceiro tipo, também denominada condição de Robim, mista ou Cauchy, como a mais apropriada para definir a entrada de solutos no solo (van GENUCHTEN e PARKER, 1984; van GENUCHTEN e WIERENGA, 1986; CLEARY, 1991 e TORIDE et al., 1993):

$$qC - \theta D \left. \frac{\partial C}{\partial z} \right|_{z \rightarrow 0^+} = qC_0 \quad \text{para } 0 < t \leq t_0 \quad [2.32]$$

em que:

C_0 – concentração do soluto aplicada ($M L^{-3}$);

t_0 – tempo de aplicação da solução (T).

Adicionalmente, FEIKE et al. (1991) e COSTA (1998) apresentam, em seus trabalhos, uma segunda equação que pode expressar a condição de entrada do produto no solo, denominada de condição do primeiro tipo:

$$C \Big|_{x \rightarrow 0^+} = C_0 \quad \text{para } 0 < t \leq t_0 \quad [2.33]$$

As bases físicas das referidas equações foram brevemente discutidas

por van GENUCHTEN e PARKER (1984) e FEIKE et al. (1991). Segundo os autores, a equação (2.33) é corretamente empregada para sistemas em que aceita-se a hipótese de continuidade da concentração do soluto na superfície do solo. Isso é possível quando o reservatório, contendo a solução do produto químico, está fisicamente conectado à superfície do solo. Em caso contrário, deve-se adotar a equação (2.32), que considera a possibilidade de ocorrência de pequena difusão molecular e dispersão na superfície do solo. TORIDE et al. (1995) consideram a equação (2.32) como a preferida para a maioria dos cenários que envolvem o transporte de solutos no solo.

Por outro lado, a condição de contorno freqüentemente utilizada para definir a saída do soluto da região física estudada é, segundo van GENUCHTEN e PARKER (1984), van GENUCHTEN e WIERENGA (1986), FEIKE et al. (1991), PARLANGE et al. (1992), TORIDE et al. (1993) e TSUBOYAMA et al. (1994),

$$\frac{\partial C}{\partial z}(L, t) = 0 \quad [2.34]$$

Para esta condição ser válida supõe-se que, na saída da região física estudada, a concentração é macroscopicamente contínua, não ocorrendo qualquer ruptura do escoamento da solução provocada pelos macroporos do solo (van GENUCHTEN e PARKER, 1984; PARLANGE et al., 1992).

2.2.2 Retenção de solutos no solo

A retenção pode ser vista como um processo chave para a determinação do destino dos produtos químicos no sistema solo-água (LEMLEY et al., 1988; TRUMAN e LEONARD, 1991 e STEHOUWER et al., 1994). Normalmente é referida como a habilidade que o solo possui para aprisionar uma molécula química, retardando ou evitando o seu movimento dentro da matriz do solo (KOSKINEN e HARPER, 1990).

O processo de retenção pode ser descrito por meio das isotermas de adsorção, as quais representam, em uma dada temperatura, a relação entre a quantidade de soluto adsorvida à fase sólida do solo e a sua concentração na

solução do solo. Na literatura, encontram-se disponível um grande número de isotermas que podem ser utilizadas para estimar a retenção de solutos no solo (HINZ et al., 1994), destacando-se as isotermas de Langmuir e Freundlich, representadas respectivamente pelas equações (2.35) e (2.36).

$$S = \frac{a^* b^* C}{1 + a^* C} \quad [2.35]$$

$$S = K_d C^{n^*} \quad [2.36]$$

em que:

b^* – adsorção máxima do soluto no solo ($M M^{-1}$);

K_d – coeficiente de partição ou distribuição ($L^3 M^{-1}$);

a^* , n^* – constantes empíricas.

Quanto à adequacidade das isotermas, o processo de retenção, em vários tipos de solos, tem sido melhor descrito por meio da isoterma de Freundlich (GREEN e KARICKHOFF, 1990). CLEARY (1991) reforça o exposto, afirmando que a isoterma de Freundlich é a expressão mais comumente utilizada em estudos de contaminação de água subterrânea.

Na isoterma de Freundlich, o expoente “ n^* ” geralmente assume valores menores ou iguais a 1,0. Um caso particular ocorre quando o seu valor torna-se igual à unidade. Nesse caso, a relação funcional entre a concentração do soluto associada com as fases líquida e sólida do solo é representada por uma linha reta, ocasionando o equilíbrio linear de adsorção (GREEN e KARICKHOFF, 1990 e JURY et al., 1991). Os formatos típicos das isotermas de Langmuir e Freundlich, bem como do equilíbrio linear de adsorção, podem ser visualizados na Figura 1.

Segundo van GENUCHTEN e WIERENGA (1986) e HINZ et al. (1994), a isoterma linear de adsorção, de um modo geral, é válida para baixas concentrações. Sobre o mesmo tema, CLEARY (1991) relata que se a concentração de equilíbrio do soluto for menor que a metade do seu limite de solubilidade, a isoterma linear de adsorção é possivelmente válida.

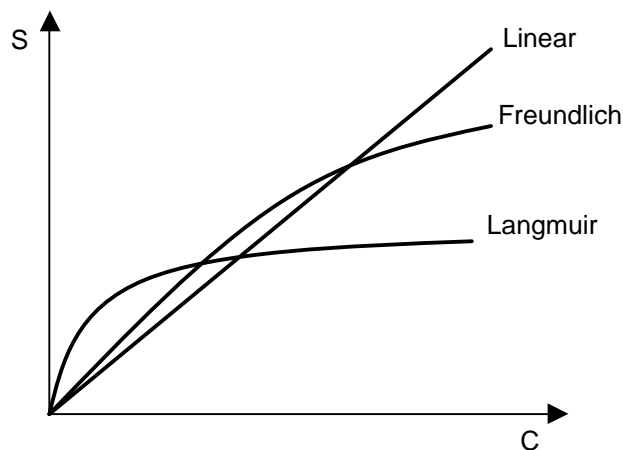


Figura 1 – Visão esquemática das isothermas de Langmuir e Freundlich.

2.3 Extração de Água e Solutos pelas Plantas

Como um processo dinâmico, o transporte da água e solutos no solo resulta da interação de diversos fatores intrínsecos e extrínsecos ao solo. Como fator intrínseco ao solo pode-se relacionar, entre outros, a sua permeabilidade, a qual é função das características texturais do meio, de sua homogeneidade, e de sua estabilidade estrutural. Os fatores extrínsecos são aqueles associados às fontes e aos sumidouros de água e soluto no solo. Como exemplo, pode-se citar a extração de água e solutos pelo sistema radicular das plantas. Aliado à drenagem artificial, esses fatores condicionam a existência de diferentes situações físicas para a dinâmica da água e solutos no solo.

2.3.1 Evaporação no solo e transpiração das plantas

Por definição, evapotranspiração potencial da cultura (ET_p) é a máxima taxa na qual a água pode ser extraída do solo, considerando o efeito combinado da evaporação no solo e a transpiração da planta. Ela pode ser determinada diretamente, por meio de métodos experimentais, ou estimada através da seguinte relação:

$$ET_p = K_c ET_0 \quad [2.37]$$

em que:

ET_p – evapotranspiração potencial da cultura ($L T^{-1}$);

K_c – coeficiente da cultura (adimensional);

ET_0 – evapotranspiração de referência ($L T^{-1}$).

Em modelos matemáticos, no entanto, é freqüente utilizar-se separadamente os processos de transpiração da planta e evaporação no solo para medir a quantidade de água extraída do perfil do solo. JENSEN et al. (1990) fazem algumas considerações sobre esse assunto. De acordo com os autores, apesar de ambos os processos serem controlados por variáveis climatológicas, a evaporação no solo e a transpiração da planta podem ser considerados processos fisicamente diferentes.

Há caminhos para particionar a evapotranspiração potencial em transpiração potencial e evaporação potencial. Um método relativamente simples foi apresentado por VANCLOOSTER et al. (1994), FARIA e MADRAMOOTOO (1996) e MONTENEGRO (1997). Segundos estes autores, a estimativa da evaporação e a transpiração potencial pode ser realizada utilizando-se as seguintes equações:

$$E_p = e^{-0,6 IAF} \times ET_p \quad [2.38]$$

$$T_p = ET_p - E_p \quad [2.39]$$

em que:

E_p – evaporação potencial no solo ($L T^{-1}$);

IAF – índice de área foliar ($L^2 L^{-2}$);

T_p – transpiração potencial da cultura ($L T^{-1}$).

O índice de área foliar pode ser calculado utilizando-se a seguinte equação:

$$IAF = \frac{A \times PP}{10000} \quad [2.40]$$

em que:

A – área foliar por planta ($L^2 \text{ planta}^{-1}$);

PP – densidade de plantio (planta L^{-2}).

A área foliar, por sua vez, pode ser calculada de acordo com o tempo térmico acumulado (TTA) desde a emergência, utilizando a equação de Gompertz:

$$A = A_0 \exp(-B \exp(-k \times TTA)) \quad [2.41]$$

em que:

A_0 – área foliar máxima por planta (L^2);

TTA – tempo térmico acumulado ($^{\circ}C$);

k, B – parâmetros empíricos da equação (adimensional).

Como limitação desse método, as equações (2.38) e (2.39) não consideram a evaporação da água livre interceptada pela cobertura vegetal, que segundo Linsley, citado por TUCCI (1993), pode chegar a 25% da precipitação anual. Entretanto o uso dessas equações permitiu um aceitável ajuste dos dados simulados pelo modelo desenvolvido por FARIA e MADRAMOOTOO (1996) com os dados obtidos em experimentos de campo.

2.3.2 Função extratora

Quando analisa-se a utilização das funções extratoras, os modelos que descrevem o transporte de água e solutos podem ser agrupados em duas diferentes linhas (CARDON e LETEY, 1992). No primeiro grupo estão os modelos fundamentados nos trabalhos de Gardner, o qual apresenta uma visão microscópica da extração de água e solutos no solo. Em geral, nesses modelos, a função extratora toma a seguinte forma:

$$R = GK' \Psi \quad [2.42]$$

em que “K” ($L T^{-1}$) é o termo condutividade, geralmente a condutividade hidráulica do solo; “ Ψ ” (L) é o termo relativo a diferença de potencial, geralmente a diferença entre o potencial da água no solo e no sistema radicular; e “G” (L^{-2}) é o termo relacionado com a geometria do escoamento. Na literatura há vários exemplos de modelos que empregam esse formato de equação para definir a extração de água e soluto. Como exemplo pode-se citar os trabalhos de NEUMAN et al. (1975) e GEELHOED et al. (1997).

No segundo grupo estão os modelos que descrevem o processo de extração de água e solutos a partir de uma visão macroscópica. A grande vantagem dessa linha de modelos é a simplicidade e relativa facilidade de uso. Como exemplo, podem-se citar os trabalhos de SELIM e ISKANDAR (1981), VANCLOOSTER et al. (1994) e VOGEL et al. (1996), os quais representam a extração de água por meio da seguinte equação:

$$R = \frac{R(z, t) \times K(h)}{\int_0^{RD_m} R(z, t) \times K(h) dz} \times T_p(t) \times F(z, t, h) \quad [2.43]$$

em que:

- R – extração de água pelas plantas (T^{-1});
- $R(z, t)$ – função densidade de raízes ($M L^{-3}$);
- RD_m – profundidade máxima do sistema radicular (L);
- $F(z, t, h)$ - fator empírico (adimensional).

O fator empírico “F” representa a razão entre as taxas de absorção de água real e potencial.

Quanto à extração de solutos, parece não haver um consenso na descrição matemática, uma vez que vários pesquisadores têm apresentado diferentes funções extratoras para representar o processo de absorção pelas plantas. Um certo destaque, no entanto, pode ser dado ao trabalho de BEESE e WIERENGA (1980), no qual é apresentado uma equação para extração de solutos semelhante à extração de água, isto é:

$$\Gamma = \frac{R(z,t) \times K(h)}{\int_0^{RD_m} R(z,t) \times K(h) dz} T_p(t) \times F(z,t,h) \times C(z,t) \quad [2.44]$$

em que:

Γ – extração de solutos pelas plantas ($M L^{-3} T^{-1}$)

A proposta de Beese e Wierenga em considerar a extração de água e solutos fisicamente semelhante parece ser bastante razoável, já que as plantas não absorvem somente água, mas sim, solução do solo. Adicionalmente, TILLOTSON e WAGENET (1982), NOUR el-DIN et al. (1986) e VOGEL et al. (1996) corroboraram com o trabalho de BEESE E WIERENGA (1980). Os primeiros autores comentam que a absorção de nitrogênio só ocorre durante o período de transpiração das plantas, enquanto que NOUR el-DIN et al. (1986) e VOGEL et al. (1996) fazem a mesma representação do termo extração para as equações de transporte de água e solutos no solo.

2.4 Modelos de transporte de água e solutos no solo

Existe na literatura vários modelos utilizados para avaliar o transporte de água e solutos no solo. Embora sejam bastante variáveis quanto a complexidade e precisão, esses modelos têm-se mostrados úteis na previsão de contaminação do solo e das águas subterrâneas, pelo uso de produtos químicos na agricultura.

O objetivo desses modelos é obter as funções $\theta(z,t)$ e $C(z,t)$ que descrevem a distribuição temporal e espacial da umidade e concentração do soluto no solo, para condições iniciais e de contorno apropriadas. Essas funções são comumente obtidas a partir das equações (2.8) e (2.29) usando-se técnicas analíticas e numéricas.

Como exemplos de modelos matemáticos avançados que utilizam técnicas numéricas, pode-se citar o modelo HYDRUS, desenvolvido por VOGEL et al. (1996) e o WAVE, desenvolvido por VANCLOOSTER et al. (1994).

No modelo HYDRUS a simulação pode ser dividida em dois módulos básicos: 1) o módulo água, que determina a umidade do solo em cada camada

do perfil, considerando a evapotranspiração, crescimento radicular e o fenômeno de histerese, e 2) o módulo soluto, que estima a concentração de substâncias químicas nas camadas do solo, considerando os processos de produção e degradação do produto. Como o modelo considera que as constantes de produção e degradação do produto são influenciadas pela umidade e temperatura do solo, o modelo apresenta um módulo que calcula o processo de transferência de calor.

O modelo WAVE é um produto de vários projetos de pesquisas desenvolvidos pelo IWONL (Institute for the Encouragement of Scientific Research in Agriculture and Industry, Bélgica) e os Diretórios Gerais VI e XII da União Européia. Como no modelo EPIC, o WAVE é um modelo que apresenta em sua estrutura diferentes módulos de simulação: água, soluto, nitrogênio, calor e cultura. No módulo água, a umidade é determinada iterativamente pelo método de Newton-Raphson. O módulo soluto, baseado no modelo LEACHN, desenvolvido por Wagenet e Hutson, 1991, citado por VOGEL et al. (1996), considera a hipótese de ocorrência de duas regiões de transporte de solutos no solo, a região de fluxo dinâmico e a região de estagnação. Nas regiões de estagnação o deslocamento se dá essencialmente por difusão, portanto, sensivelmente mais lento do que na região de fluxo dinâmico, onde predomina o fluxo de massa. No WAVE, o módulo nitrogênio baseia-se nos modelos SOILN (BERGSTROM et al., 1991) e SWATNIT (VERECKEN et al., 1991).

3. MATERIAL E MÉTODOS

O presente trabalho foi desenvolvido em duas etapas, ambas realizadas com intuito de desenvolver um modelo matemático capaz de prever o transporte unidimensional de água e solutos no solo, considerando a presença de cultura. Na primeira etapa, a partir do método de diferenças finitas, procurou-se encontrar as soluções numéricas das equações diferenciais gerais que regem o transporte de água e solutos no solo e elaborar um programa computacional para implementação das soluções numéricas obtidas. Na segunda, conduziu-se um experimento, em casa de vegetação do Departamento de Solos da UFV, para testar o modelo desenvolvido.

3.1 Desenvolvimento Matemático do Modelo

3.1.1 Região física estudada

O modelo SIMASS-C (**S**imulação do **M**ovimento de **Á**gua e **S**olutos no **S**olo considerando a presença de **C**ultura) é essencialmente unidimensional vertical. O modelo considera a existência de heterogeneidade do solo, na forma de camadas, as quais são divididas em espaços denominados de compartimentos. No contorno de cada compartimento são especificados dois nós para que sejam utilizados pelas técnicas de diferenças finitas. A Figura 2 apresenta uma visão esquemática da região física estudada, incluindo o

sistema de orientação empregado.

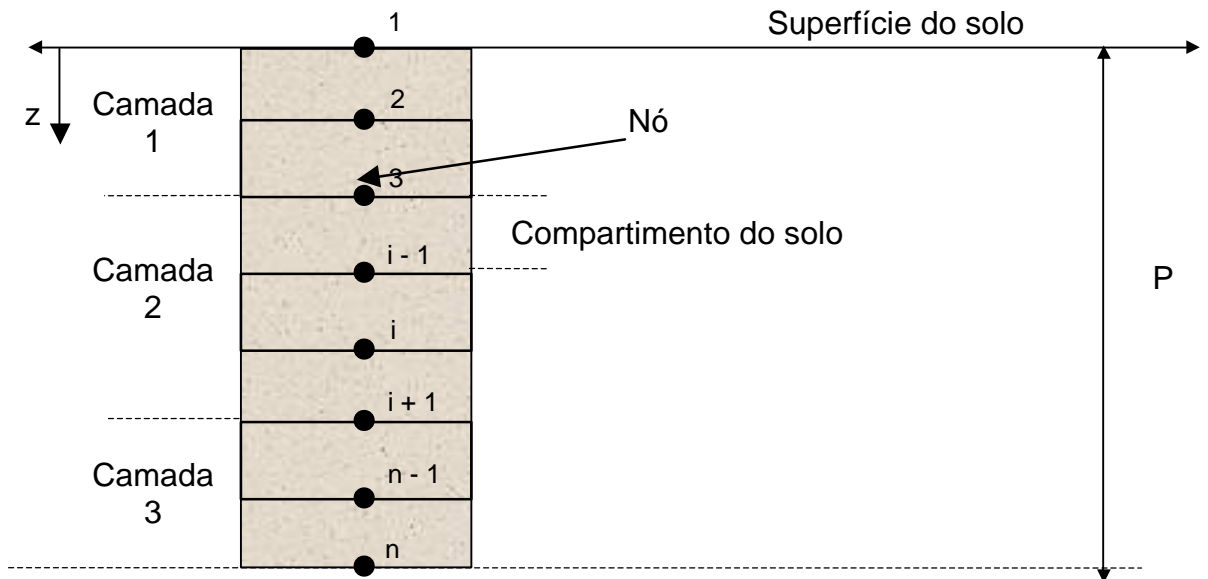


Figura 2 – Esquema da região física utilizada para simulação pelo modelo SIMASS-C, discretizada em “n” nós.

3.1.2 Equação do movimento de água no solo

O escoamento de água em meio poroso isotérmico e isobárico, sob condições de não saturação, geralmente é descrito pela equação de Richards. Incluindo-se o termo fonte/sumidouro para representar a extração de água pela cultura e considerando a origem do sistema de coordenada na superfície do solo, orientado positivamente para baixo, a equação (2.6) toma o seguinte formato:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] + R \quad [3.1]$$

em que:

R – termo fonte/sumidouro de água (T^{-1}).

Introduzindo o termo capacidade hídrica específica, temos:

$$E(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] + R \quad [3.2]$$

Como a capacidade hídrica específica e a condutividade hidráulica são funções de “h” a equação (3.2) é necessariamente não-linear, necessitando de técnicas numéricas para obtenção de solução menos restritiva.

No modelo SIMASS-C a solução numérica é obtida em duas etapas. Inicialmente, uma primeira estimativa do potencial matricial é encontrada utilizando-se um esquema de discretização implícita com linearização explícita da equação (3.2). Em seguida é realizado um refinamento dessa solução pelo processo iterativo de Newton-Raphson, com um esquema de discretização implícita da equação (3.1). Em ambos os casos, as soluções das equações fornecem um sistema tridiagonal de equações lineares que é resolvido pelo algoritmo de Thomas.

3.1.2.1 Primeira estimativa da solução numérica da equação do movimento de água no solo

Considerando o esquema de discretização implícita com linearização explícita, a primeira estimativa do potencial matricial do solo é obtida pela seguinte aproximação da equação (3.2):

$$E_i^j \frac{h_i^{j+1} - h_i^j}{\Delta t} = \frac{K_{i+1/2}^j \left[\frac{h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right] - K_{i-1/2}^j \left[\frac{h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right]}{\Delta z} + R_i^j \quad [3.3]$$

em que o subscrito “i” representa a posição do nó na malha de discretização e o sobrescrito “j”, o incremento do tempo. A malha numérica com as respectivas posições das variáveis “h”, “K” e “E” é ilustrada na Figura 3. Pode ser visto na equação (3.3) que o termo $\partial h / \partial z$ é avaliado no final do intervalo de tempo (discretização implícita), enquanto “K” e “E” são iguais aos seus valores no início do intervalo de tempo (linearização explícita).

Os valores de condutividade hidráulica em cada compartimento de solo são obtidos, tomando-se a média aritmética dos valores de condutividade dos

nós vizinhos.

$$K_{i-1/2}^j = \frac{K_{i-1}^j + K_i^j}{2} \quad [3.4]$$

$$K_{i-1/2}^j = \frac{K_i^j + K_{i+1}^j}{2} \quad [3.5]$$

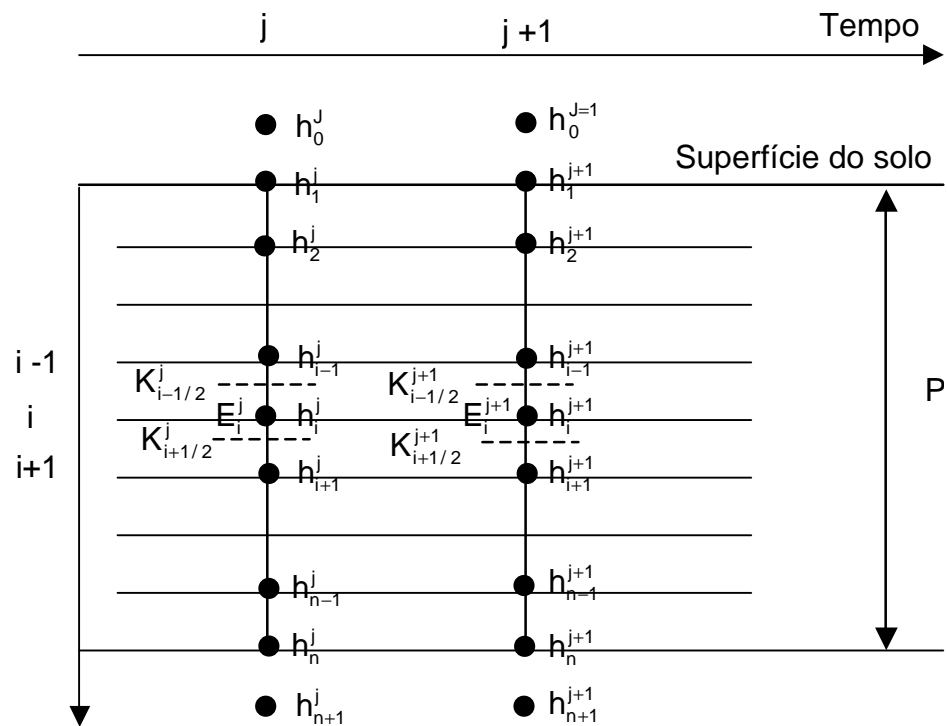


Figura 3 – Malha numérica, com localização de h , K e E na forma apresentada pela equação (3.3).

Rearranjando a equação (3.3), encontramos o seguinte sistema de equações:

$$a_i h_{i-1}^{j+1} + b_i h_i^{j+1} + c_i h_{i+1}^{j+1} = d_i \quad [3.6]$$

em que:

$$a_i = -\frac{\Delta t}{\Delta Z^2} K_{i-1/2}^j;$$

$$b_i = E_i^j + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} (K_{i+1/2}^j + K_{i-1/2}^j);$$

$$c_i = -\frac{\Delta t}{\Delta Z^2} K_{i+1/2}^j;$$

$$d_i = E_i^j h_i^j - \frac{\Delta t}{\Delta Z} K_{i+1/2}^j + \frac{\Delta t}{\Delta Z} K_{i-1/2}^j + \Delta t R_i^j.$$

A equação (3.6), no formato apresentado, é válida para os nós centrais, excluindo-se o primeiro e o último nó, cujas equações estão condicionadas às condições de contorno.

a) Condição de contorno tipo Dirichlet

Neste caso, os valores de potenciais matriciais do primeiro e último nó são conhecidos em qualquer tempo. Consequentemente, o sistema de equações (3.6) é limitado pelos nós $i=2$ e $i = n-1$ e as equações para estes nós tornam-se, respectivamente:

$$b_2 h_2^{j+1} + c_2 h_3^{j+1} = \varepsilon_2 \quad [3.7]$$

em que:

$$\varepsilon_2 = d_2 - a_2 h_1^{j+1}.$$

$$a_{n-1} h_{n-2}^{j+1} + b_{n-1} h_{n-1}^{j+1} = \varepsilon_{n-1} \quad [3.8]$$

em que:

$$\varepsilon_{n-1} = d_{n-1} - c_{n-1} h_n^{j+1}.$$

b) Condição de Contorno tipo Neumann

Para esta condição, os valores de potenciais matriciais do primeiro e último nó não são conhecidos. Consequentemente, o sistema de equações

(3.6) é composto de “n” equações correspondentes aos “n” nós da região discretizada.

A equação (3.6) aplicada ao primeiro nó, é representada por:

$$a_1 h_0^{j+1} + b_1 h_1^{j+1} + c_1 h_2^{j+1} = d_1 \quad [3.9]$$

em que:

h_0 – potencial matricial em um ponto fictício, fora da região de estudo (L).

Considerando a expansão dos termos e relacionando à superfície do solo, após o processo de discretização, a equação (2.11) pode ser representada por:

$$q_s^{j+1} = -K_{1-1/2}^j \left(\frac{h_1^{j+1} - h_0^{j+1}}{\Delta z} \right) + K_{1-1/2}^j \quad [3.10]$$

em que:

q_s – fluxo através da superfície do solo ($L T^{-1}$).

Rearranjando a equação (3.10), para explicitar o potencial matricial “ h_0 ”, obtêm-se:

$$h_0^{j+1} = h_1^{j+1} + \frac{\Delta z q_s^{j+1}}{K_{1-1/2}^j} - \Delta z \quad [3.11]$$

Substituindo a equação (3.11) na equação (3.9), e explicitando suas incógnitas, tem-se:

$$(a_1 + b_1) h_1^{j+1} + c_1 h_2^{j+1} = e_1 \quad [3.12]$$

em que:

$$a_1 + b_1 = E_1 + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} K_{1+1/2}^j ;$$

$$c_1 = -\frac{\Delta t}{\Delta Z^2} K_{1+1/2}^j;$$

$$e_1 = E_1^j h_1^j - \frac{\Delta t}{\Delta Z} K_{1+1/2}^j + \frac{\Delta t}{\Delta Z} q_s^{j+1} + \Delta t R_1^j.$$

No modelo SIMASS-C o valor de “ q_s ” é dependente das condições de umedecimento e secagem do solo. Para condições de umedecimento, “ q_s ” deve ser igual à capacidade de infiltração do solo (CI) se a intensidade de precipitação (IP) for maior que CI, ou igual à IP, caso ocorra o contrário. Durante o período de secagem, “ q_s ” será igual à capacidade de evaporação no solo (CE) se a demanda atmosférica (DA) for maior que CE, ou igual à DA, caso ocorra o contrário.

As capacidades de infiltração e evaporação no solo são calculadas por meio da equação:

$$CI \text{ ou } CE = -\frac{K_2^j + K_1^j}{2} \left[\frac{h_2^j - h_1^j}{\Delta Z} - 1 \right] \quad [3.13]$$

Semelhante ao procedimento adotado por FARIA e MADRAMOOTOO (1996), durante o processo de infiltração, para efeito de cálculo de “CI”, o valor da condutividade hidráulica do solo para o nó $i = 1$ é considerado igual à condutividade hidráulica do solo saturado.

Para o último nó a equação (3.6) é representada por:

$$a_n h_{n-1}^{j+1} + b_n h_n^{j+1} + c_n h_b^{j+1} = d_n$$

Considerando o nó fictício $i = n+1$ e adotando-se o mesmo procedimento matemático usado para o nó $i = 1$, a equação (2.11) pode ser representada por:

$$q_b^{j+1} = -K_{n+1/2}^j \left(\frac{h_b^{j+1} - h_n^{j+1}}{\Delta Z} \right) + K_{n+1/2}^j$$

em que:

q_b – fluxo na base da região física estudada ($L T^{-1}$)

Portanto, o sistema de equação (3.6), para o nó $i = n$, torna-se igual à:

$$a_n h_{n-1}^{j+1} + (b_n + c_n) h_n^{j+1} = f_n \quad [3.14]$$

em que:

$$a_n = -\frac{\Delta t}{\Delta Z^2} K_{n-1/2}^j;$$

$$b_n + c_n = E_n^j + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} K_{n-1/2}^j;$$

$$f_n = E_n^j h_n^j + \frac{\Delta t}{\Delta Z} K_{n-1/2}^j - \frac{\Delta t}{\Delta Z} q_b^{j+1} + \Delta t R_n^j.$$

No modelo SIMASS-C, quando o valor de “ q_b ” não for fixado pelo usuário, o mesmo será calculado considerando-se as condições de escoamento no último compartimento da região estudada, isto é:

$$q_b = -\frac{K_n^j + K_{n-1}^j}{2} \left[\frac{h_n^j - h_{n-1}^j}{\Delta Z} - 1 \right] \quad [3.15]$$

3.1.2.2 Refinamento para a solução numérica da equação do movimento de água no solo

O procedimento adotado até o momento não é iterativo, ou seja, para cada intervalo de tempo, o cálculo para determinação de “ h ” é efetuado apenas uma vez. No entanto, a linearização explícita da capacidade hídrica específica pode promover erros numéricos, principalmente se houver grande variação no conteúdo de umidade ou quando o teor de umidade do solo está próximo da saturação (VANCLOOSTER et al.,1994). Para reduzir esse erro, o modelo SIMASS-C utiliza-se da técnica de Newton-Raphson e da equação (3.1), a qual é discretizada conforme visto anteriormente e resolvida iterativamente até atingir o erro admissível.

Partindo-se da equação (3.1), após o processo de discretização, pode-se definir uma função auxiliar “ F ” como sendo igual à:

$$F_i = \frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} - \frac{K_{i+1/2}^{j+1} \left[\frac{h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right] - K_{i-1/2}^{j+1} \left[\frac{h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right]}{\Delta z} - R_i^j \quad [3.16]$$

Pelo método de Newton-Raphson, a melhor solução é obtida quando:

$$F_i^\tau + \left[\frac{\partial F_i^\tau}{\partial h_{i-1}^{j+1}} + \frac{\partial F_i^\tau}{\partial h_i^{j+1}} + \frac{\partial F_i^\tau}{\partial h_{i+1}^{j+1}} \right] \left((h_i^{j+1})^{\tau+1} - (h_i^{j+1})^\tau \right) = 0 \quad [3.17]$$

O sobrescrito “ τ ” refere-se a ordem da iteração. As derivadas parciais da função auxiliar são obtidas facilmente através da equação (3.16), o que resulta em:

$$\frac{\partial F_i}{\partial h_i^{j+1}} = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \theta_i^{j+1}}{\partial h_i^{j+1}} + \frac{K_{i+1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} + \frac{K_{i-1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} = \frac{E_i^{j+1}}{\Delta t} + \frac{K_{i+1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} + \frac{K_{i-1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} \quad [3.18]$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial h_{i-1}^{j+1}} = - \frac{K_{i-1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} \quad [3.19]$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial h_{i+1}^{j+1}} = - \frac{K_{i+1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} \quad [3.20]$$

Substituindo as equações (3.16), (3.18), (3.19) e (3.20) na equação (3.17), introduzida pelo método de Newton-Raphson, tem-se:

$$\left(\frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} \right)^\tau - \frac{(K_{i+1/2}^{j+1})^\tau \left[\frac{(h_{i+1}^{j+1})^{\tau+1} - (h_i^{j+1})^{\tau+1}}{\Delta z} - 1 \right] - (K_{i-1/2}^{j+1})^\tau \left[\frac{(h_i^{j+1})^{\tau+1} - (h_{i-1}^{j+1})^{\tau+1}}{\Delta z} - 1 \right]}{\Delta z} - R_i^j + \left(\frac{E_i^{j+1}}{\Delta t} \right)^\tau \left((h_i^{j+1})^{\tau+1} - (h_i^{j+1})^\tau \right) = 0$$

rearranjando esta equação, encontra-se:

$$a_i (h_{i-1}^{j+1})^{\tau+1} + b_i (h_i^{j+1})^{\tau+1} + c_i (h_{i+1}^{j+1})^{\tau+1} = d_i \quad [3.21]$$

em que:

$$a_i = -\frac{\Delta t}{\Delta z^2} (K_{i-1/2}^{j+1})^\tau;$$

$$b_i = (E_i^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (K_{i+1/2}^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (K_{i-1/2}^{j+1})^\tau;$$

$$c_i = -\frac{\Delta t}{\Delta z^2} (K_{i+1/2}^{j+1})^\tau;$$

$$d_i = (E_i^{j+1} h_i^{j+1})^\tau - ((\theta_i^{j+1})^\tau - \theta_i^j) - \frac{\Delta t}{\Delta z} (K_{i+1/2}^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta z} (K_{i-1/2}^{j+1})^\tau + R_i^j \Delta t.$$

O processo iterativo é resolvido até que a convergência desejada seja alcançada. No modelo SIMASS-C, a interface com o usuário permite a escolha de dois critérios de convergência. É possível utilizar, como controle iterativo, o erro absoluto (EA) ou erro relativo (ER).

Os critérios de convergência considerando os erros absoluto e relativo são representados, respectivamente, por:

$$\text{abs}((h_i^{j+1})^\tau - (h_i^{j+1})^{\tau+1}) \leq \text{EA} \quad [3.22]$$

em que:

$(h_i^{j+1})^\tau$ – potencial matricial na iteração “ τ ”;

$(h_i^{j+1})^{\tau+1}$ – potencial matricial na iteração “ $\tau+1$ ”;

EA – erro absoluto;

$$\frac{\text{abs}((h_i^{j+1})^\tau - (h_i^{j+1})^{\tau+1})}{(h_i^{j+1})^\tau} \leq \text{ER} \quad [3.23]$$

em que:

ER – erro relativo.

O sistema de equações (3.21), no formato apresentado, é aplicado

apenas aos nós centrais, $2 \leq i < n-1$. Para os nós extremos, deve-se incorporar ao sistema de equações as condições de contorno do problema.

a) Condição de contorno tipo Dirichlet

Neste caso, os valores de potenciais matriciais do primeiro e último nó são conhecidos em qualquer tempo. Consequentemente, o sistema de equações (3.21) está delimitado pelos nós $i=2$ e $i = n-1$ e as equações para estes nós tornam-se, respectivamente:

$$b_2(h_2^{j+1})^{\tau+1} + c_2(h_3^{j+1})^{\tau+1} = \varepsilon_i \quad [3.24]$$

em que:

$$\varepsilon_2 = d_2 - a_2(h_1^{j+1})^{\tau+1}.$$

$$a_{n-1}(h_{n-2}^{j+1})^{\tau+1} + b_{n-1}(h_{n-1}^{j+1})^{\tau+1} = \varepsilon_{n-1} \quad [3.25]$$

em que:

$$\varepsilon_{n-1} = d_{n-1} - c_{n-1}(h_n^{j+1})^{\tau+1}.$$

c) Condição de Contorno tipo Neumann

Adotando-se o mesmo procedimento utilizado na primeira estimativa do potencial matricial, o sistema de equações (3.21), para os nós extremos, torna-se igual à:

$$(a_1 + b_1)(h_1^{j+1})^{\tau+1} + c_1(h_2^{j+1})^{\tau+1} = e_1 \quad [3.26]$$

em que:

$$a_1 + b_1 = (E_1^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (K_{1+1/2}^{j+1})^\tau;$$

$$c_1 = -\frac{\Delta t}{\Delta z^2} (K_{1+1/2}^{j+1})^\tau;$$

$$e_1 = (E_1^{j+1} h_1^{j+1})^\tau - ((\theta_1^{j+1})^\tau - \theta_1^j) - \frac{\Delta t}{\Delta z} (K_{1+1/2}^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta z} q_s + \Delta t R_1^j.$$

$$a_n (h_{n-1}^{j+1})^{\tau+1} + (b_n + c_n) (h_n^{j+1})^{\tau+1} = f_n \quad [3.27]$$

em que:

$$a_n = -\frac{\Delta t}{\Delta z^2} (K_{n-1/2}^{j+1})^\tau;$$

$$b_n + c_n = (E_1^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (K_{n-1/2}^{j+1})^\tau;$$

$$f_n = (E_n^{j+1} h_n^{j+1})^\tau - ((\theta_n^{j+1})^\tau - \theta_n^j) + \frac{\Delta t}{\Delta z} (K_{n-1/2}^{j+1})^\tau - \frac{\Delta t}{\Delta z} q_b + \Delta t R_n^j.$$

3.1.2.3 Extração de água pela plantas

No modelo SIMASS-C, semelhante aos trabalhos de SELIM e ISKANDAR (1981), VANCLOOSTER et al. (1994) e VOGEL et al. (1996), a representação matemática da extração de água pela planta foi realizada por meio da equação (2.43). Nesta equação o fator empírico $F(z,h,t)$ é calculado seguindo considerações feitas por BERNARDO (1996).

Por definição, a evapotranspiração real da cultura (ET_r) é a evapotranspiração da cultura em condições normais de cultivo. De acordo com BERNARDO (1996), existem várias proposições para o cálculo da ET_r , das quais as baseadas na disponibilidade de umidade do solo mostram-se mais simples e realísticas. De acordo com esta proposição, a relação entre ET_r e ET_p é expressa pelas seguintes equações:

$$ET_r = K_s ET_p \quad [3.28]$$

$$K_s = \frac{\ln(L_a + 1)}{\ln(L_t + 1)} \quad [3.29]$$

em que:

ET_r – evapotranspiração real da cultura ($L T^{-1}$);

K_s – coeficiente de umidade (adimensional);

L_a – lâmina atual de água no solo (L);

L_t – Capacidade total de água no solo (L).

No modelo SIMASS-C, a evapotranspiração potencial da cultura é calculada por meio dos métodos de Penman-Monteith ou tanque Classe A.

Considerando as afirmações de BERNARDO (1996), a evaporação real no solo e a transpiração real da cultura podem ser determinadas utilizando-se as seguintes equações:

$$E_r = e^{-0,6 IAF} \times ET_r \quad [3.30]$$

$$T_r = T_p(t) \times F(z, h, t) = ET_r - E_r \quad [3.31]$$

em que:

E_r – evaporação real no solo ($L T^{-1}$);

T_r – transpiração real da cultura ($L T^{-1}$).

A partir deste procedimento, a equação (2.43), torna-se:

$$R = \frac{R(z, t) \times K(z, h, t)}{\int_0^{RD_m} R(z, t) \times K(z, h, t) dz} \times T_r(t) \quad [3.32]$$

Vários trabalhos têm geralmente representado a densidade do sistema radicular das culturas por meio de equações lineares ou exponenciais, como exemplo, pode-se citar GERWITZ e PAGE (1974), SELIM e ISKANDAR (1981), VANCLOOSTER et al. (1994) e VOGEL et al. (1996). Nesse modelo, duas funções de densidade de raízes são utilizadas:

$$R(z, t) = a \times e^{-bz_r(t)} \quad [3.33]$$

$$R(z, t) = a z_r(t) + b \quad [3.34]$$

em que:

a, b – constante empíricas;

$z_r(t)$ – profundidade do sistema radicular (L) no tempo t após o plantio.

A profundidade do sistema radicular em função do tempo é calculada considerando um comportamento linear ou sigmoidal, como indicado nos trabalhos de FERERES et al. (1981) e BORGS e GRIMES (1986), os quais representam, respectivamente, o crescimento radicular por:

$$z_r(t) = RD_0 + (RD_m - RD_0) \frac{t_p}{t_m} \quad [3.35]$$

$$z_r(t) = RD_m \left[0,5 + 0,5 \operatorname{Sen} \left(3,03 \frac{t_p}{t_m} - 1,47 \right) \right]$$

[3.36]

em que:

RD_0 – profundidade de plantio (L);

RD_m – profundidade máxima das raízes (L);

t_p – tempo após o plantio (T);

t_m – tempo para atingir a profundidade máxima das raízes (T).

É evidente que processos de natureza fisiológica e características químicas e físicas do solo devem interferir no crescimento das raízes das plantas. No entanto, bons resultados de simulação vêm sendo obtidos com a utilização desses modelos. SUBBAIAH e RAO (1993), utilizando-se de dados experimentais em colunas de solo, realizaram uma análise comparativa entre diversos modelos empíricos desenvolvidos para simular o crescimento radicular e observaram que o modelo de FERERES et al. (1981) foi o que melhor representou os dados experimentais.

Uma vez obtido o perfil de distribuição de potencial matricial para cada intervalo de tempo, o teor de umidade correspondente a cada potencial é determinado utilizando-se os modelos de Brooks e Corey e van Genuchten, equações (2.12) e (2.14), respectivamente.

3.1.3 Equação do movimento de soluto no solo

O transporte de solutos no solo sob condições não permanente é determinado pela equação (2.29). Incluindo-se o termo fonte/sumidouro ela

pode ser representada no formato apresentado abaixo.

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial qC}{\partial z} + \Gamma \quad [3.37]$$

em que:

Γ – termo fonte/sumidouro de soluto ($M L^{-3} T^{-1}$).

Considerando a isoterma de adsorção linear, a equação (3.37) pode ser rescrita na forma:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \rho_g k_d \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial qC}{\partial z} + \Gamma \quad [3.38]$$

Expandido o lado direito da equação encontramos o formato da equação do transporte de soluto utilizado no modelo SIMASS-C.

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \rho_g k_d \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(\theta D)}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z} + (\theta D) \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - q \frac{\partial C}{\partial z} - C \frac{\partial q}{\partial z} + \Gamma \quad [3.39]$$

3.1.3.1 Solução numérica da equação do movimento de solutos no solo

Para minimizar os erros numéricos, a solução numérica da equação (3.39) foi obtida aplicando-se um esquema de discretização implícita pelo método de Crank-Nicolson (GERALD e WHEATLEY, 1984). Cada termo da equação, após a discretização, é apresentado a seguir.

$$\begin{aligned} \text{Termo: } & \frac{\partial \theta C}{\partial t} + \rho_g k_d \frac{\partial C}{\partial t} \\ & = \frac{\theta_i^{j+1} C_i^{j+1} - \theta_i^j C_i^j}{\Delta t} + \rho_{g_i} k_{d_i} \frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} \end{aligned}$$

$$= \left(\frac{\theta_i^{j+1} + \rho_{g_i} k_{d_i}}{\Delta t} \right) C_i^{j+1} - \left(\frac{\theta_i^j + \rho_{g_i} k_{d_i}}{\Delta t} \right) C_i^j$$

Termo: $\frac{\partial(\theta D)}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z}$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} - \theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} + \frac{\theta_i^j D_i^j - \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j}{\Delta z} \right) \times \frac{1}{2} \left(\frac{C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} + \frac{C_i^j - C_{i-1}^j}{\Delta z} \right)$$

$$= \frac{1}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} - \theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1} + \theta_i^j D_i^j - \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j) (C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1} + C_i^j - C_{i-1}^j)$$

denominando $H = \theta_i^{j+1} D_i^{j+1} - \theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1} + \theta_i^j D_i^j - \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j$, temos:

$$= \frac{H}{4\Delta z^2} C_i^{j+1} - \frac{H}{4\Delta z^2} C_{i-1}^{j+1} + \frac{H}{4\Delta z^2} (C_i^j - C_{i-1}^j)$$

Termo: $(\theta D) \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$

$$= \left(\frac{\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j}{2} \right) \left(\frac{C_{i+1}^{j+1} - 2C_i^{j+1} + C_{i-1}^{j+1}}{2\Delta z^2} + \frac{C_{i+1}^j - 2C_i^j + C_{i-1}^j}{2\Delta z^2} \right)$$

$$= \frac{1}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) (C_{i+1}^{j+1} - 2C_i^{j+1} + C_{i-1}^{j+1})$$

$$+ \frac{1}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) (C_{i+1}^j - 2C_i^j + C_{i-1}^j)$$

$$= \frac{1}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) C_{i+1}^{j+1} - \frac{2}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) C_i^{j+1}$$

$$+ \frac{1}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) C_{i-1}^{j+1} + \frac{1}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) (C_{i+1}^j - 2C_i^j + C_{i-1}^j)$$

Termo: $-C \frac{\partial q}{\partial z}$

$$\begin{aligned}
 &= -\left(\frac{C_{i-1}^{j+1} + C_{i-1}^j}{2}\right) \left(\frac{q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1}}{2\Delta z} + \frac{q_i^j - q_{i-1}^j}{2\Delta z}\right) \\
 &= -\frac{1}{4\Delta z} (C_{i-1}^{j+1} + C_{i-1}^j)(q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j) \\
 &= -\frac{1}{4\Delta z} (q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j)C_{i-1}^{j+1} - \frac{1}{4\Delta z} (q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j)C_{i-1}^j
 \end{aligned}$$

Termo: $-q \frac{\partial C}{\partial z} + \Gamma$

$$\begin{aligned}
 &= -\left(\frac{q_{i-1}^{j+1} + q_{i-1}^j}{2}\right) \left(\frac{C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1}}{2\Delta z} + \frac{C_i^j - C_{i-1}^j}{2\Delta z}\right) + \Gamma_i^j \\
 &= -\frac{1}{4\Delta z} (q_{i-1}^{j+1} + q_{i-1}^j)(C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1} + C_i^j - C_{i-1}^j) + \Gamma_i^j \\
 &= -\frac{1}{4\Delta z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j)C_i^{j+1} + \frac{1}{4\Delta z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j)C_{i-1}^{j+1} - \frac{1}{4\Delta z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j)(C_i^j - C_{i-1}^j) + \Gamma_i^j
 \end{aligned}$$

reorganizando os termos da equação encontramos:

$$p_i C_{i-1}^{j+1} + q_i C_i^{j+1} + r_i C_{i+1}^{j+1} = s_i \quad [3.40]$$

em que:

$$\begin{aligned}
 p_i &= -\frac{\Delta t}{4\Delta z^2} (\theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1} + \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j) + \frac{\Delta t}{4\Delta z} (q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j) \\
 &\quad - \frac{\Delta t}{4\Delta z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j);
 \end{aligned}$$

$$q_i = \theta_i^{j+1} + \rho_{g_i} k_{d_i} + \frac{\Delta t}{4\Delta z^2} (\theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1} + \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j) + \frac{\Delta t}{4\Delta z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j) + \frac{\Delta t}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j);$$

$$r_i = -\frac{\Delta t}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j);$$

$$s_i = (\theta_i^j + \rho_{g_i} k_{d_i}) C_i^j + \frac{\Delta t}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} - \theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1} + \theta_i^j D_i^j - \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j) (C_i^j - C_{i-1}^j) - \frac{\Delta t}{4\Delta z} (q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j) C_{i-1}^j - \frac{\Delta t}{4\Delta z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j) (C_i^j - C_{i-1}^j) + \Gamma_i^j \Delta t + \frac{\Delta t}{4\Delta z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) (C_{i+1}^j - 2C_i^j + C_{i-1}^j).$$

A representação matemática da extração de solutos pela planta é realizada por meio da equação (2.44), considerando-se o conceito de evapotranspiração real da cultura, discutido no item 3.1.2.3.

$$\Gamma = \frac{R(z, t) \times K(h)}{\int_0^{RD_m} R(z, t) \times K(h) dz} T_r(t) \times C(z, t) \quad [3.41]$$

A equação (3.40), no formato apresentado, é válida para os nós centrais, excluindo-se o primeiro e o último nó, os quais estão condicionados às condições de contorno.

a) Condição de contorno tipo Dirichlet

Neste caso, a concentração C_1 e C_n são conhecidas em qualquer tempo, e o sistema de equações (3.40) inicia-se a partir do nó $i = 2$ até $i = n-1$. Para estes nós, o sistema de equações torna-se, respectivamente:

$$q_2 C_2^{j+1} + r_2 C_3^{j+1} = \omega_2 \quad [3.42]$$

em que:

$$\omega_2 = s_2 - p_2 C_1^{j+1}.$$

$$p_{n-1} C_{n-2}^{j+1} + q_{n-1} C_{n-1}^{j+1} = \omega_{n-1} \quad [3.43]$$

em que:

$$\omega_{n-1} = s_{n-1} - r_{n-1} C_n^{j+1}.$$

b) Condição de Contorno tipo Cauchy

Para encontrar a solução numérica da equação (3.39) submetidas às equações (2.32) e (2.34), que representam respectivamente a condição de contorno tipo fluxo para o movimento de solutos no solo no primeiro e último nós, utilizou-se o seguinte procedimento:

O sistema de equações (3.40), aplicado ao primeiro nó, é representado por:

$$p_1 C_a^{j+1} + q_1 C_1^{j+1} + r_1 C_2^{j+1} = s_1 \quad [3.44]$$

em que:

C_a – concentração em um ponto fictício, fora da região de estudo ($M L^{-3}$).

Considerando a expansão dos termos, após o processo de discretização, a equação (2.32) pode ser representada por:

$$q_i^{j+1} C_i^{j+1} - \theta_i^{j+1} D_i^{j+1} \left(\frac{C_i^{j+1} - C_a^{j+1}}{\Delta z} \right) = q_i^{j+1} C_0 \quad [3.45]$$

Rearranjando a equação (3.45) para explicitar a concentração fictícia, obtém-se:

$$C_a^{j+1} = \frac{q_i^{j+1} \Delta z}{\theta_i^{j+1} D_i^{j+1}} C_0 + \left(1 - \frac{q_i^{j+1} \Delta z}{\theta_i^{j+1} D_i^{j+1}} \right) C_i^{j+1} \quad [3.46]$$

Substituindo a equação (3.46) na equação (3.44), e denominando $\alpha = \frac{q_1^{j+1} \Delta z}{\theta_1^{j+1} D_1^{j+1}}$, encontra-se:

$$t_1 C_1^{j+1} + r_1 C_2^{j+1} = u_1 \quad [3.47]$$

em que:

$$t_1 = p_1 - p_1 \alpha + q_1;$$

$$u_1 = s_1 - p_1 \alpha C_0 .$$

Deve-se ressaltar que a solução numérica considerando a ausência de aplicação de solutos no solo, é facilmente obtida fazendo-se C_0 igual à zero nas equações acima mencionadas.

Utilizando-se um procedimento semelhante para o último nó, mas considerando a equação (2.34) ao invés da equação (2.32), o sistema de equações (3.40) fica representado por:

$$p_n C_{n-1}^{j+1} + (q_n + r_n) C_n^{j+1} = s_n \quad [3.48]$$

3.1.4 Desenvolvimento do programa computacional

O modelo SIMASS-C foi desenvolvido em linguagem Delphi, com compilador Turbo Delphi 3.0. O programa é interativo, pois, permite ao usuário escolher os tipos de condições de contorno que serão utilizados na solução das equações de transporte de água e solutos no solo, bem como os modelos de curva de retenção de umidade do solo e de crescimento e densidade radicular da cultura.

O fluxograma resumido do programa computacional desenvolvido está apresentado nas Figuras 4 a 7.

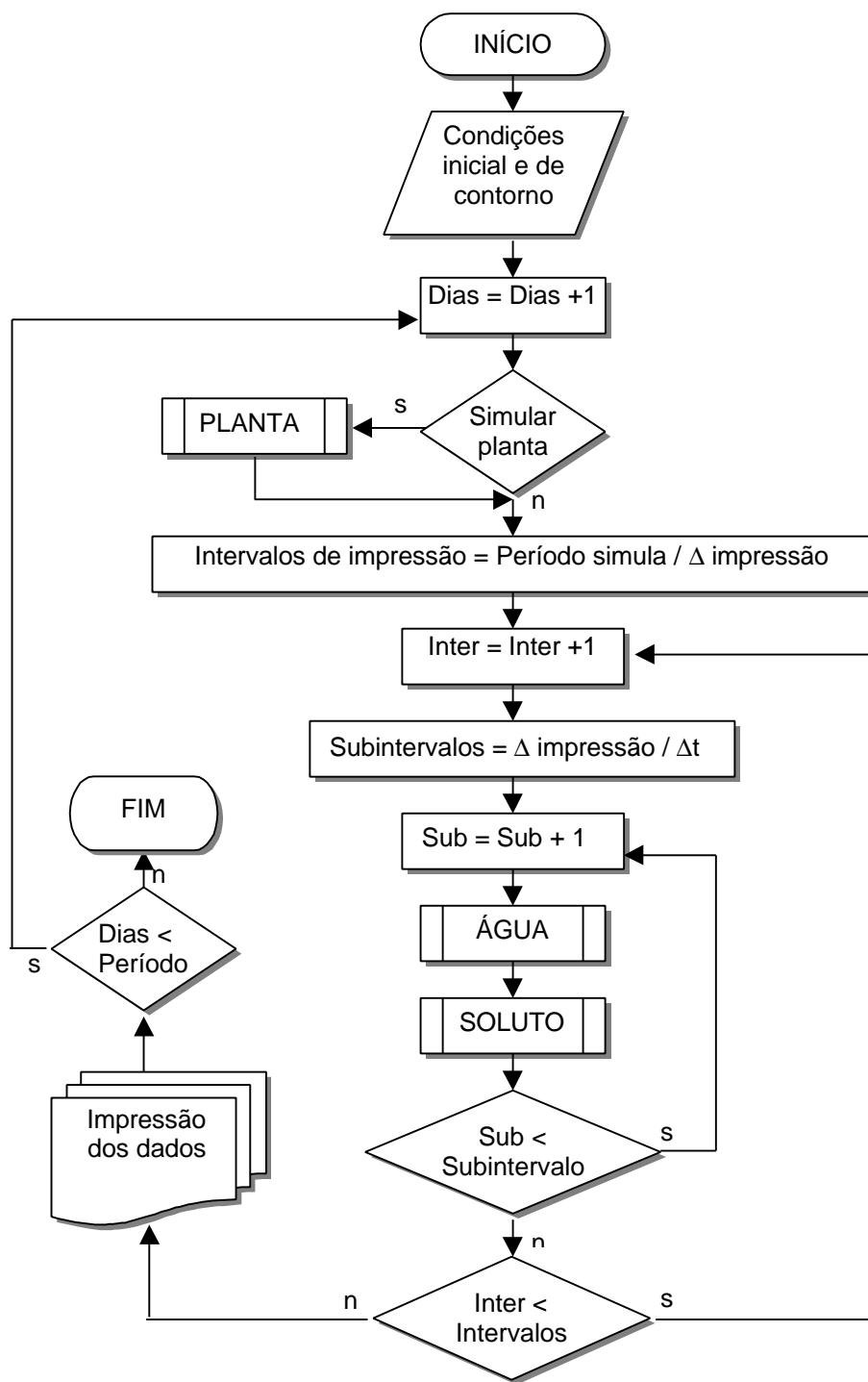


Figura 4 – Fluxograma do módulo principal do modelo SIMASS-C.

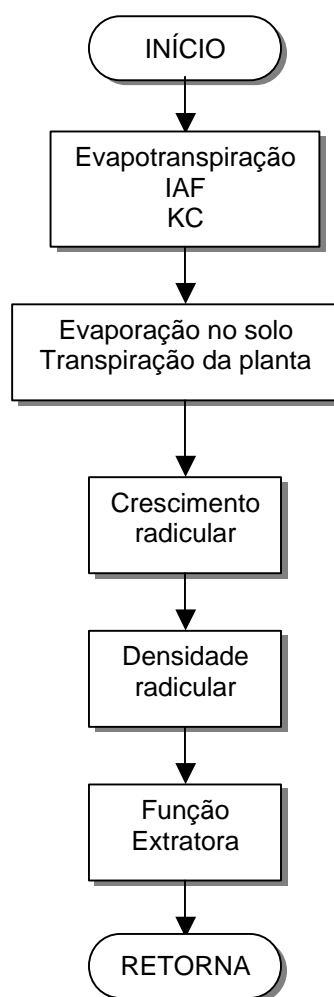


Figura 5 – Fluxograma do módulo PLANTA do modelo SIMASS-C.

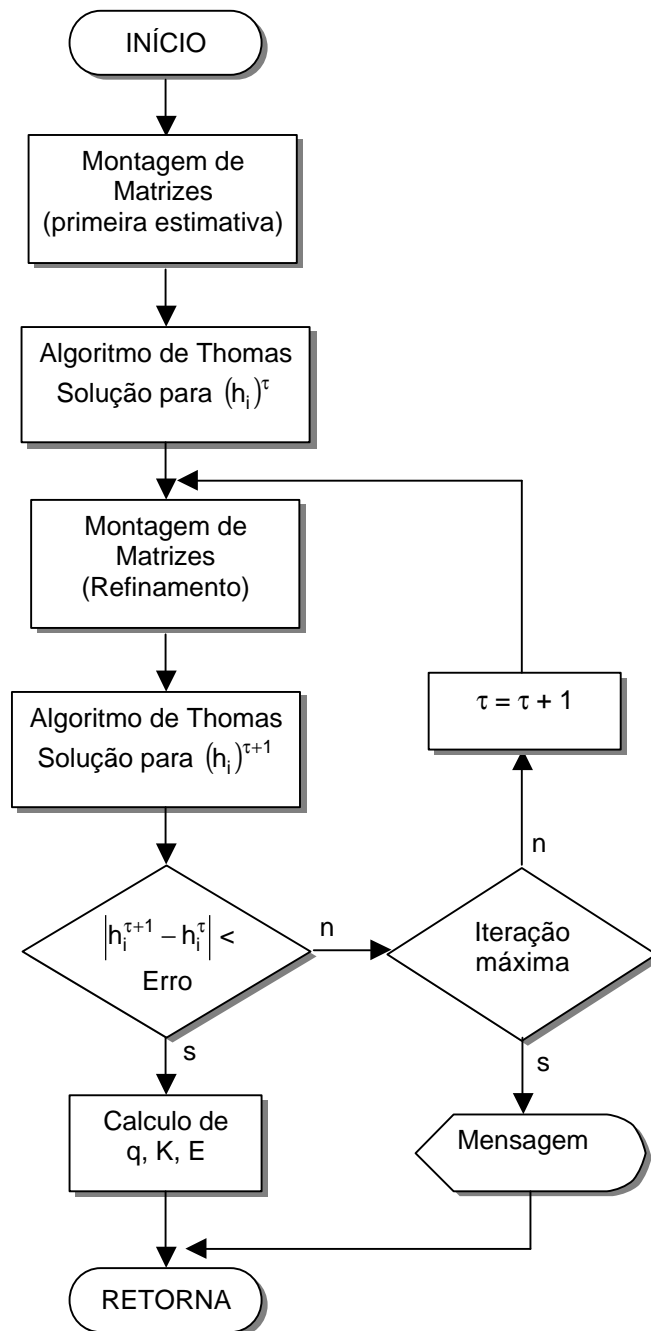


Figura 6 – Fluxograma do módulo ÁGUA do modelo SIMASS-C.

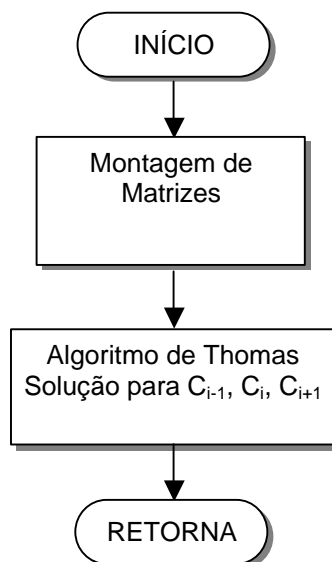


Figura 7 – Fluxograma do módulo SOLUTO do modelo SIMASS-C.

Os dados de entrada do modelo SIMASS-C são:

Dados do solo:

- Profundidade do solo (cm)
- Umidade de saturação, $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$
- Umidade de capacidade de campo, $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$
- Umidade de ponto de murcha, $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$
- Umidade residual, $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$
- Condutividade hidráulica do solo saturado, cm h^{-1}
- Parâmetros dos modelos van Genuchten/ Brooks e Corey
- Massa específica do solo, g cm^{-3}
- Dispersividade, cm
- Potencial matricial ou umidade inicial, cm ou $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$

Dados da cultura:

Data do plantio

Data da colheita

Índice de área foliar

Área foliar máxima, $\text{cm}^2 \text{ planta}^{-1}$

Temperatura basal, $^{\circ}\text{C}$

Densidade de plantio, planta m^{-2}

Parâmetros empíricos b e k, adimensional

Coefficiente da cultura (K_c), adimensional

Sistema radicular

Período de crescimento das raízes, dias

Profundidade de semeadura, cm

Profundidade máxima das raízes, cm

Parâmetros empíricos a e b, adimensional

Dados Climáticos:

Temperatura máxima, $^{\circ}\text{C}$

Temperatura mínima, $^{\circ}\text{C}$

Temperatura do bulbo úmido, $^{\circ}\text{C}$

Temperatura do bulbo seco, $^{\circ}\text{C}$

Luz solar, h

Velocidade do vento, m s^{-1}

Precipitação, mm

Duração da precipitação, h

Dados da simulação:

Data de início da simulação

Data de término da simulação

Intervalo de tempo para exibição dos resultados (horas)

Delta Z (cm)

Delta T (horas)

Número máximo de iterações

Precisão desejada (adimensional)

Dados do soluto:

Coefficiente de difusão em água pura, $\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$

Coefficiente de partição, adimensional

Concentração inicial do soluto, g cm^{-3}

O programa exhibe como dados de saída o potencial matricial, a umidade, o fluxo e a concentração do soluto no perfil do solo ao longo do tempo. Apresenta também a variação da evapotranspiração, índice de área foliar, crescimento e densidade radicular da cultura ao longo do tempo.

3.2 Procedimento Experimental

Para testar o modelo desenvolvido, conduziu-se um experimento semelhante ao adotado por AZEVEDO et al. (1996), em casa de vegetação do Departamento de Solos da Universidade Federal de Viçosa (UFV).

3.2.1 Características do material de solo

Em todas as parcelas experimentais utilizaram-se amostras homogêneas de solo, permitindo, desta forma, uma melhor avaliação do modelo de transporte desenvolvido. Segundo LEMLEY et al. (1988), muitos problemas relacionados à quantificação do transporte de contaminantes no campo devem-se à impossibilidade de controle das condições de variabilidade. SASSNER et al. (1994), fazem comentários semelhantes, afirmando que a condução de experimentos em condições reais de campo sofre pela heterogeneidade exibida pelos solos, que ocasiona uma significativa variabilidade do fluxo e dos parâmetros de transporte.

O material de solo empregado foi retirado de um Latossolo Vermelho-Amarelo álico (LVa), localizado nas proximidades da cidade de Viçosa-MG. As amostras, do horizonte B, foram secas ao ar e passadas em peneira com

malha de 2 mm (terra fina seca ao ar, TFSA). Uma parte da amostra foi separada para a determinação da curva de retenção de água do solo, utilizando-se o equipamento de placa de pressão. As demais características do solo utilizadas como dados de entrada do modelo, apresentadas no Quadro 1, foram obtidas no laboratório de Química e Física do Solo da própria Universidade, de acordo com as recomendações da EMBRAPA (1997).

Quadro 1 - Características físico-hídricas do material solo estudado.

Características	Valor
Umidade de saturação (θ_s , $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$)	0,58
Umidade de capacidade de campo (θ_{cc} , $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$)	0,43
Umidade de ponto de murcha (θ_{pm} , $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$)	0,29
Umidade residual (θ_r , $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$)	0,15
Massa específica do solo (ρ_g , g cm^{-3})	1,13
Condutividade hidráulica do solo saturado (K_o , cm h^{-1})	3,00
Dispersividade (λ , cm)	0,55
Curva de Retenção (van Genuchten)	
Parâmetro “ α ”	0,03278
Parâmetro “ n ”	1,5158

De posse dos resultados da análise química foram efetuadas a fertilização e calagem do solo, mantendo-o incubado por um período de 30 dias com umidade próxima à capacidade de campo. Terminada a incubação, as amostras de solo foram novamente secadas ao ar e peneiradas.

3.2.2 Transporte de nitrato em colunas de solo

De posse das amostras de TFSA, 42 colunas de solo foram montadas, em tubo de PVC rígido de 50 cm de comprimento e 25 cm de diâmetro externo e dispostas em delineamento inteiramente casualizado na bancada de ensaio, a qual pode ser esquematicamente visualizada na Figura 8.

Para facilitar a montagem e posterior análise, as colunas foram formadas por cinco anéis concêntricos de 10 cm de altura, que foram unidos com auxílio de fita adesiva. Os anéis que formavam a base das colunas de solo apresentavam-se com sua borda externa totalmente fechada com filme de PVC. Na parede lateral desses anéis, próximo ao filme de PVC, foram introduzidas mangueiras flexíveis, com o intuito de permitir a coleta da água de drenagem.

O preenchimento do solo foi executado de forma a proporcionar uniformidade e homogeneidade em toda a coluna, adicionando-se o solo em camadas de aproximadamente 2 cm de espessura e exercendo leve pressão com um disco de madeira. Nesse momento, procurou-se estabelecer massa específica do solo próxima às condições reais de campo.

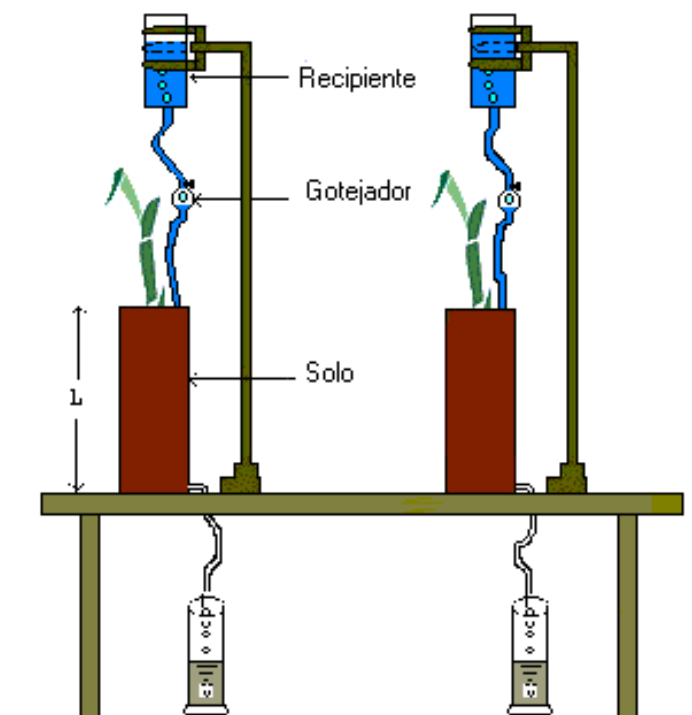


Figura 8 – Visão esquemática da bancada de ensaio utilizada para avaliar o transporte de nitrato no solo.

Para uniformizar a umidade inicial, as colunas de solo foram saturadas, a partir de sua base, com aplicação de água corrente. Garantida a saturação, as extremidades superiores das colunas foram cobertas com filme plástico, objetivando evitar perdas de água por evaporação, e as colunas de solo, deixadas em repouso por um período de 24 horas, para possibilitar a drenagem total do excesso de água. Esse instante caracterizou a condição inicial para a umidade do solo, ou seja, quando se encerrou a drenagem livre em todo o perfil da coluna, em 17/11/2000.

Uma vez padronizada a umidade inicial do solo, quatro sementes de milho (*Zea mays* L.), variedade BR-201, foram semeadas em cada coluna de solo. Após a emergência, o que ocorreu aproximadamente quatro dias após o plantio, em 21/11/2000, promoveu-se o desbaste da cultura, deixando-se apenas uma plântula. A opção pelo milho baseou-se por ser uma cultura que apresenta uma vasta informação disponível e exigir quantidades expressivas de fertilizantes nitrogenados ao longo do seu ciclo vegetativo.

Durante a condução do experimento, com o auxílio de um sistema de gotejamento adaptado, realizou-se a aplicação de lâminas de irrigação em intervalos semanais, respeitando-se, nessas ocasiões, a demanda hídrica da cultura e a capacidade de retenção do solo.

O cálculo da necessidade hídrica da cultura do milho no período foi determinado por meio da evapotranspiração diária, a qual foi estimada pela pesagem de 12 colunas de solo da parcela experimental. Em cada coluna, a lâmina de água evapotranspirada foi considerada como sendo a diferença observada no peso da coluna em duas pesagens consecutivas, espaçadas de 24 horas.

Em 28/11/2000 e 11/12/2000, realizou-se a aplicação de duas lâminas de fertirrigação, promovidas pela adição de KNO_3 , na proporção correspondente à 30 e 90 kg N ha⁻¹. As duas adições foram realizadas com o intuito de monitorar o transporte de NO_3^- no solo, aplicando-se o produto na extremidade superior de cada coluna. Após a última adição do fertilizante, realizou-se a aplicação de uma lâmina de 50 mm, objetivando simular a ocorrência de uma chuva de igual magnitude.

Para evitar a formação de fluxo preferencial pelas paredes da tubulação, as lâminas de água e as soluções com o fertilizante foram aplicadas com o

auxílio de anéis de PVC com diâmetro de 20 cm e 2 cm de altura, os quais foram fincados na extremidade superior da coluna, deixando-se aproximadamente uma borda de um centímetro.

Imediatamente antes da última aplicação do fertilizante e às 12, 24, 48 e 72 horas após a aplicação do produto químico, três colunas de solo foram desmontadas e amostras de solo foram retiradas nas profundidades de 0, 5, 10, 15, 20, 30, e 35 cm. Esse processo destrutivo consumiu 15 colunas de solo durante o experimento. Nas amostragens, o sistema radicular do milho era cuidadosamente separado do solo, por peneiramento, e o material de solo acondicionado em recipientes de alumínio e sacos plásticos. Neste material foram determinadas a umidade do solo, utilizando-se o método gravimétrico, e a concentração de nitrato, extraído com KCl, utilizando-se a determinação colorimétrica mediante redução com sulfato de hidrazina, de acordo com a metodologia descrita por ALEF e NANNIPIERI (1995).

3.2.3 Crescimento e densidade radicular da cultura

Para a determinação do crescimento e densidade radicular em função do tempo, após o desbaste da cultura do milho, em intervalos consecutivos de aproximadamente cinco dias, três colunas de solo foram desmontadas, e a parte aérea e o sistema radicular da cultura foram colhidos e separados, totalizando 15 colunas de solo. Nessas ocasiões, aproveitou-se também para acondicionar e transportar amostras de solo para o laboratório para determinação da umidade do solo e da concentração de nitrato.

O crescimento radicular foi obtido a partir da verificação visual da profundidade do sistema radicular nos anéis que formavam as colunas de solo.

Quanto a densidade das raízes, 25% do volume total de solo contidos em cada anel foram retirados nas várias profundidades estudadas. Para separar as raízes do material solo, cada amostra raiz/solo foi colocada em equilíbrio térmico com o meio, tratada com solução de pirofosfato de sódio (10g/l) e deixada em repouso por 24 horas, para dispersão das argilas. A mistura foi peneirada em malha 1 mm, sob jatos d'água, para reter as partículas da fração areia e raízes, as quais foram transferidas, com o auxílio de uma piseta, para um becker de 500 ml. Jatos de água, com intensidade

controlada, foram dirigidos ao becker, de modo que os materiais sobrenadantes (raízes), transbordassem e fossem retidos em peneiras. A densidade de raízes foi determinada após a secagem dos órgãos contidos em cada anel em estufa de ventilação forçada, a 80 °C, por 72 horas e pesagem em balança de precisão.

3.3 Teste do Modelo SIMASS-C

De posse da distribuição temporal e espacial de nitrato, o modelo foi testado comparando-se as concentrações de nitrato obtidas experimentalmente com aquelas simuladas pelo programa computacional.

Nas simulações, optou-se pelo modelo de van Genuchten para caracterizar a curva de retenção de água do solo. Os parâmetros “ α ” e “ n ”, necessários para a descrição das curvas de retenção e condutividade hidráulica do solo, foram ajustados mediante a utilização do “software” aplicativo Genucht, versão 2.14, desenvolvido em 1990 pela ESALQ/USP. Para o cálculo da condutividade hidráulica do solo saturado utilizaram-se ensaios de laboratório com o permeâmetro de carga constante.

No teste do modelo, a incompatibilidade das equações de Penman-Monteith e tanque Classe “A” no cálculo da evapotranspiração de referência em ambiente protegido, exigiu que fosse criada uma tela adicional, onde os valores medidos da evapotranspiração eram incorporados ao modelo como dados de entrada.

Adicionalmente, realizou-se a análise de sensibilidade do modelo aos parâmetros de transporte de nitrato, especificamente, verificando se o resultado das simulações, quando adotados valores distintos para o coeficiente de partição de nitrato no solo, apresentavam comportamento diferenciado. Por fim, analisou-se também a proximidade dos resultados de simulação obtidos pelo modelo SIMASS-C com o modelo CXTFIT, desenvolvido por PARKER e van GENUCHTEN (1984), que considera a solução analítica da equação do transporte de solutos no solo.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na apresentação da análise do modelo SMASS-C, tornou-se necessário seguir uma ordem de discussão, dando ênfase inicialmente à apresentação do “software” aplicativo. Posteriormente, os resultados simulados, utilizando-se o modelo desenvolvido, são comparados com os resultados experimentais. Em seguida é feita a análise de sensibilidade do modelo ao coeficiente de partição de nitrato do solo e, finalmente, a análise comparativa entre os resultados obtidos com a solução numérica utilizada pelo modelo SIMASS-C e a solução analítica utilizada pelo modelo CXTFIT (PARKER e van GENUCHTEN, 1984).

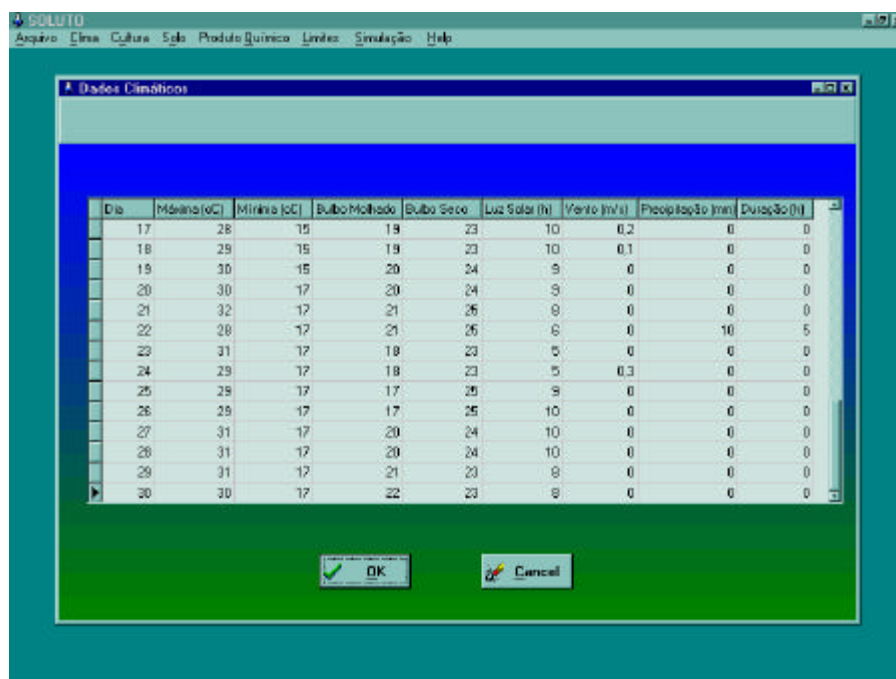
4.1 Apresentação do Modelo SIMASS-C

Apresenta-se, na seqüência, uma descrição da interface do modelo SIMASS-C, mostrando a sua flexibilidade de uso, e alguns resultados de simulações. As simulações aqui apresentadas foram realizadas com o intuito de verificar se o modelo matemático correspondia à realidade física do problema quando submetido à diferentes cenários.

O modelo foi estruturado em módulos visando facilitar a sua utilização pelo usuário. No menu da tela principal (Figura 9) podemos observar a existência dos seguintes módulos: Arquivo, Clima, Cultura, Solo, Produto Químico, Limites, Simulação e Help.

O módulo Arquivo serve apenas para o manuseio de arquivos de entrada e de saída do programa.

Na opção Clima, é possível fornecer os valores diários de precipitação e parâmetros climáticos necessários ao cálculo da evapotranspiração (Figura 9). Esta informação é utilizada quando se faz simulações considerando a extração de água pela cultura.



Dia	Máxima (C)	Mínima (C)	Bulbo Molhado	Bulbo Seco	Luz Solar (h)	Vento (m/s)	Precipitação (mm)	Duração (h)
17	28	15	19	23	10	0.2	0	0
18	29	15	19	23	10	0.1	0	0
19	30	15	20	24	9	0	0	0
20	30	17	20	24	9	0	0	0
21	32	17	21	26	9	0	0	0
22	28	17	21	26	6	0	10	5
23	31	17	18	23	5	0	0	0
24	29	17	18	23	5	0.3	0	0
25	29	17	17	25	9	0	0	0
26	29	17	17	25	10	0	0	0
27	31	17	20	24	10	0	0	0
28	31	17	20	24	10	0	0	0
29	31	17	21	23	9	0	0	0
30	30	17	22	23	9	0	0	0

Figura 9 – Tela mostrando o menu principal e o módulo de entrada de dados climáticos.

Ao acessar o módulo Cultura (Figura 10), o usuário definirá os dados referentes ao período de desenvolvimento da cultura, ao índice de área foliar e coeficientes de cultura. Ao pressionar o botão “OK” abre-se outra tela (Figura 11), na qual é possível fornecer informações relativas ao desenvolvimento do sistema radicular da cultura. Nesta tela é possível selecionar entre dois modelos para simular o desenvolvimento do sistema radicular. Para o crescimento de raízes pode-se escolher entre um modelo linear e um sigmoidal, enquanto que para a densidade de raízes tem-se como opção o modelo linear ou exponencial.

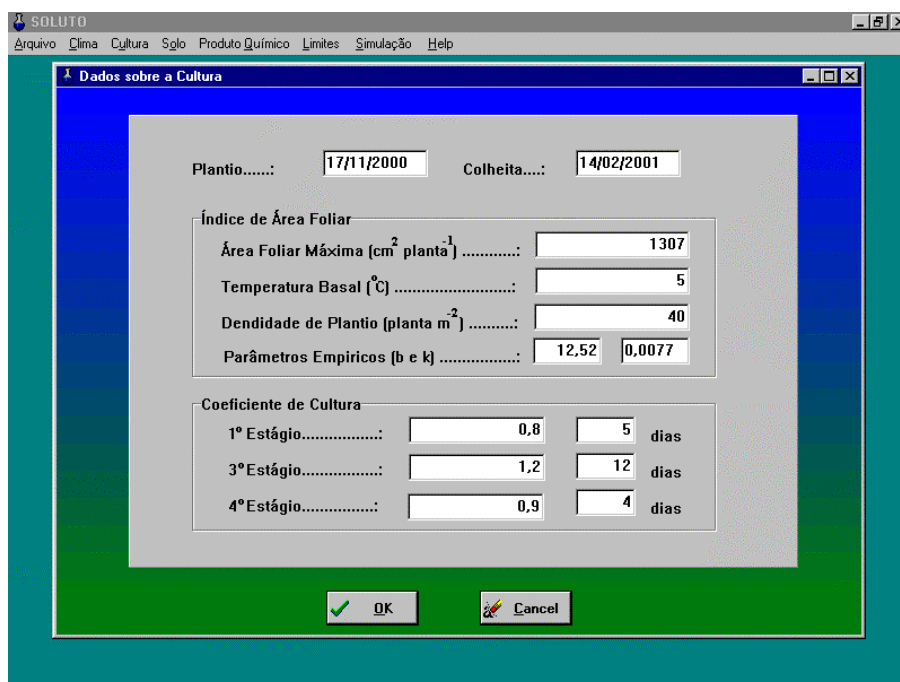


Figura 10 – Módulo de entrada de dados referentes a cultura.

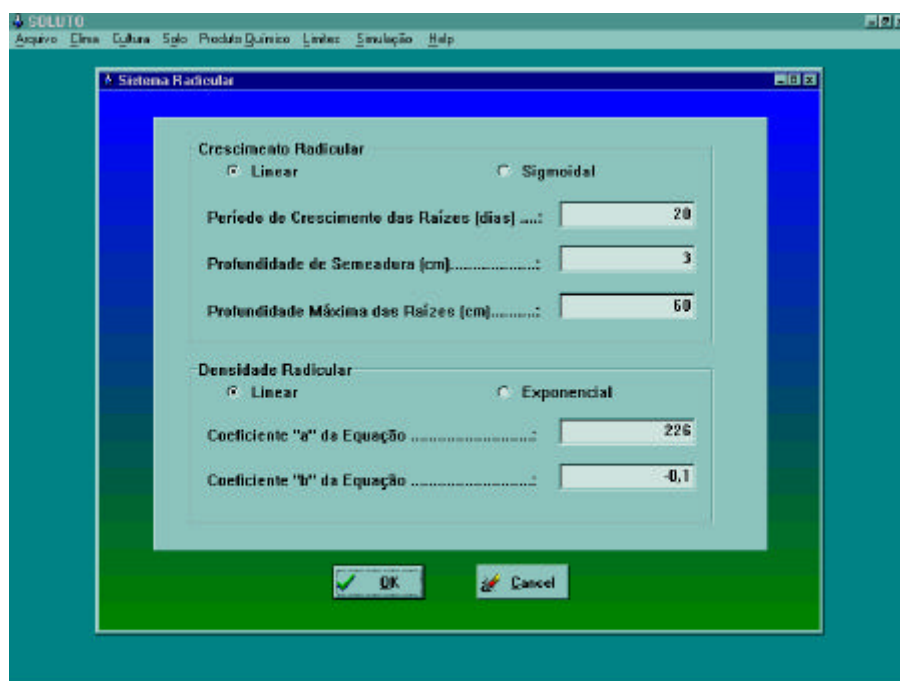


Figura 11 – Tela de entrada de dados relativos ao desenvolvimento do sistema radicular.

Selecionando-se o módulo Solo surgirão duas opções de telas. Uma relacionada aos parâmetros de solo (Figura 12), na qual entra-se com os valores de umidade do solo em condições de saturação, de capacidade de campo, de ponto de murcha permanente, e os valores de umidade residual, de dispersividade e de condutividade hidráulica do solo saturado. A segunda opção é relativa aos modelos utilizados para simular a curva de retenção de água no solo (Figura 13). Nessa tela é possível selecionar entre os modelos de van Genuchten e de Brooks e Corey. Para ambos os modelos é permitido, ao usuário, entrar diretamente com os valores dos parâmetros do modelo escolhido. Adicionalmente, para o modelo de Brooks e Corey é permitido também ajustar os parâmetros do modelo, por meio da curva de retenção de água do solo (Figura 14). Em etapa posterior a esse trabalho será também implementado o ajuste dos parâmetros do modelo de van Genuchten a partir da curva de retenção de água do solo.

O módulo Produto Químico permite o acesso à entrada dos parâmetros de transporte e de retenção do produto químico no solo. Estes parâmetros são o coeficiente de difusão e o coeficiente de partição do soluto no solo (Figura 15).

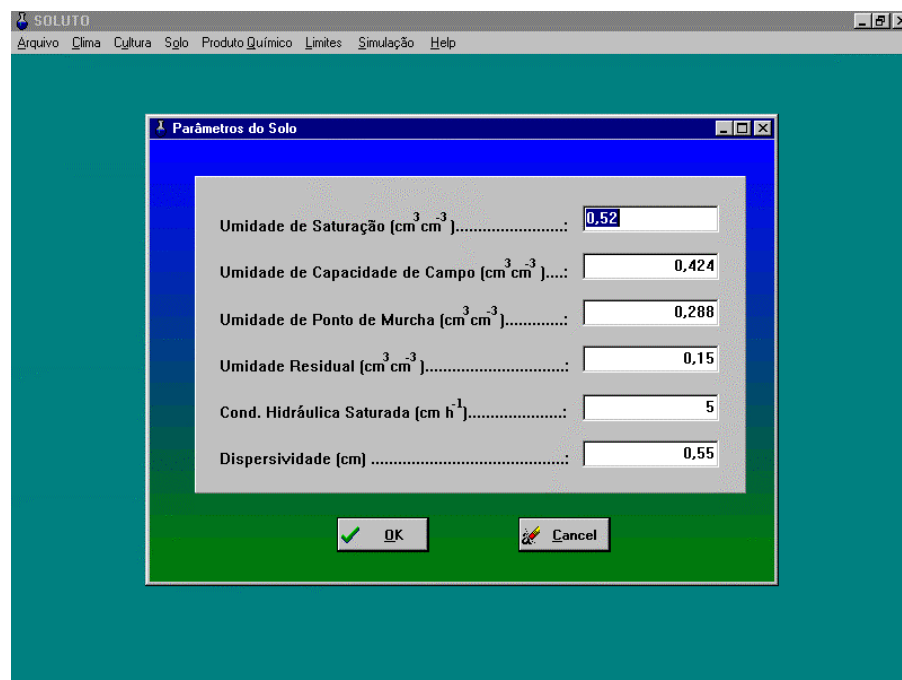


Figura 12 – Tela de entrada dos parâmetros físico-hídricos do solo.

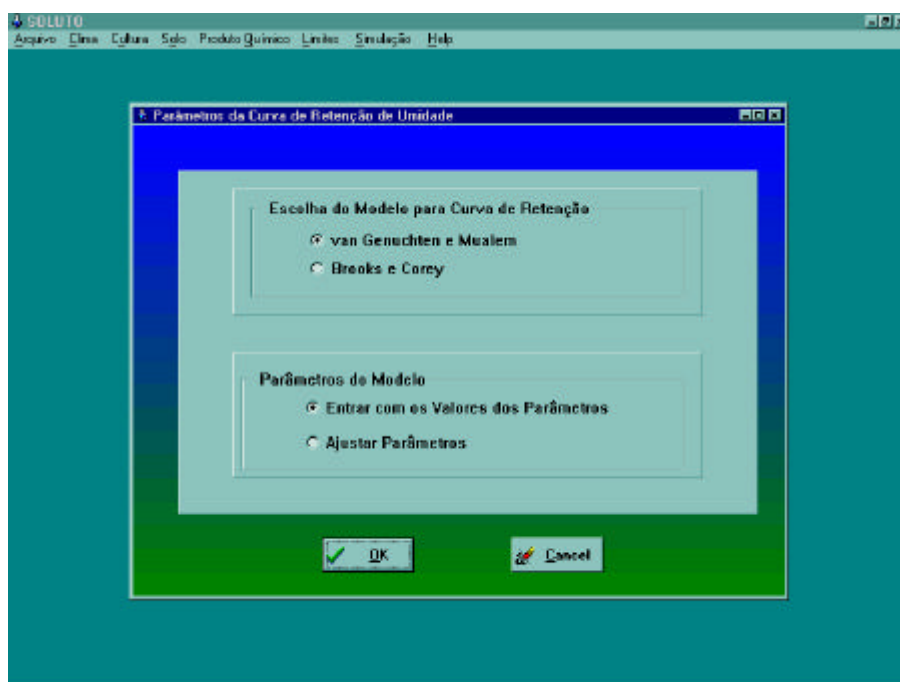


Figura 13 – Tela para seleção do modelo a ser usado para simular a curva de retenção.

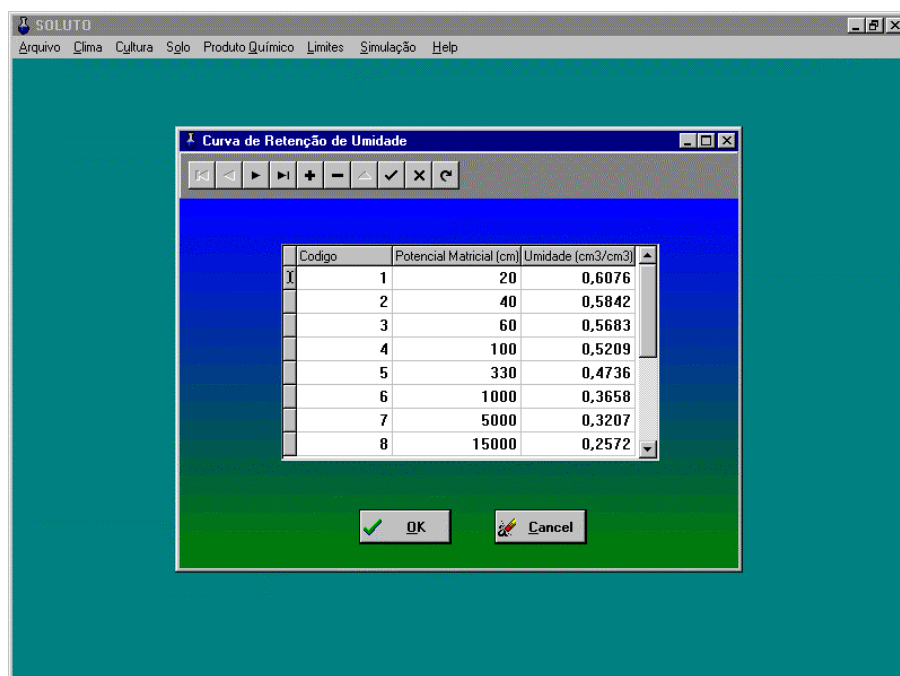


Figura 14 – Tela para ajuste dos parâmetros do modelo de Brooks e Corey a partir da curva de retenção de umidade do solo.

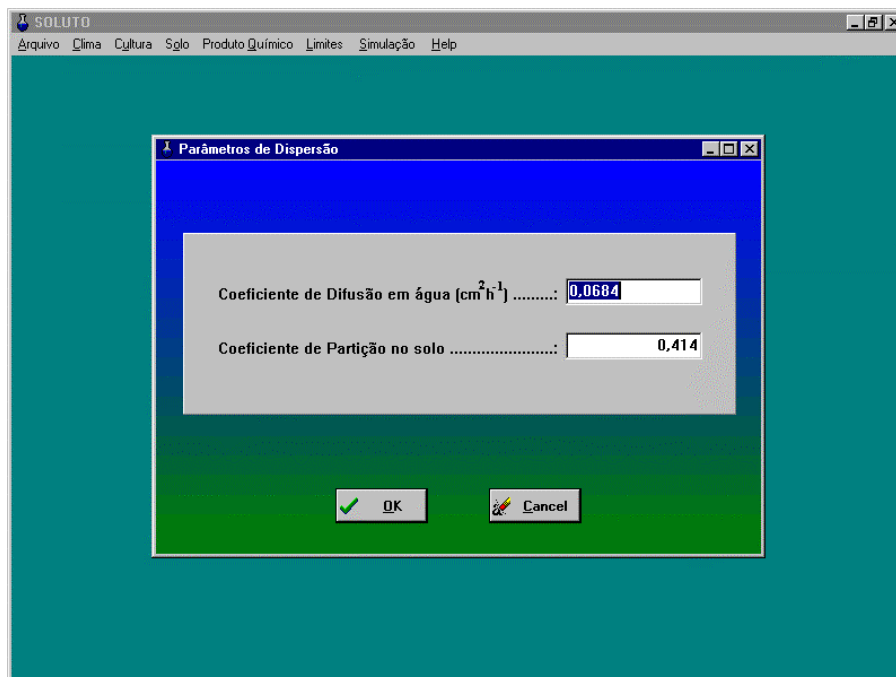


Figura 15 – Tela para entrada dos parâmetros de transporte do soluto no solo.

No módulo Limites o usuário entrará com as condições iniciais do problema (Figura 16) e selecionará o tipo de condições de contorno (Figura 17). A condição inicial relativa a água no solo poderá ser dada na forma de potencial matricial ou umidade.

As opções de condições de contorno (Figura 17), tanto para a água quanto para o soluto, são do tipo fluxo e potencial ou concentração constante. O usuário fará a escolha de acordo com o problema que estiver simulando. Assim, se estiver simulando o processo de infiltração, como ocorre em um infiltrômetro de anel, deverá selecionar potencial constante na superfície do solo e fluxo na base da coluna de solo; caso esteja simulando uma fertirrigação, deverá selecionar, tanto para o movimento de água quanto para o transporte de soluto, fluxo na superfície. Caso exista lençol freático a uma dada profundidade, deve-se selecionar potencial constante e igual a zero na base da coluna. Enfim, pode-se, desta maneira, simular diferentes cenários, o que demonstra a flexibilidade do modelo em realizar simulações. O procedimento para incorporar os valores das condições de contorno no modelo será apresentado posteriormente.

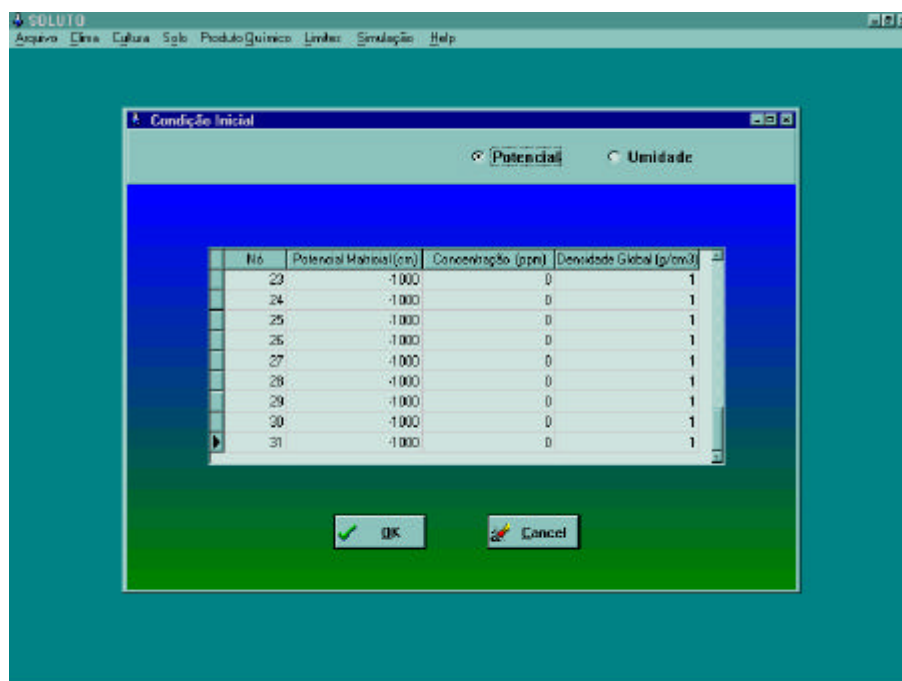


Figura 16 – Tela para entrada das condições iniciais do problema.

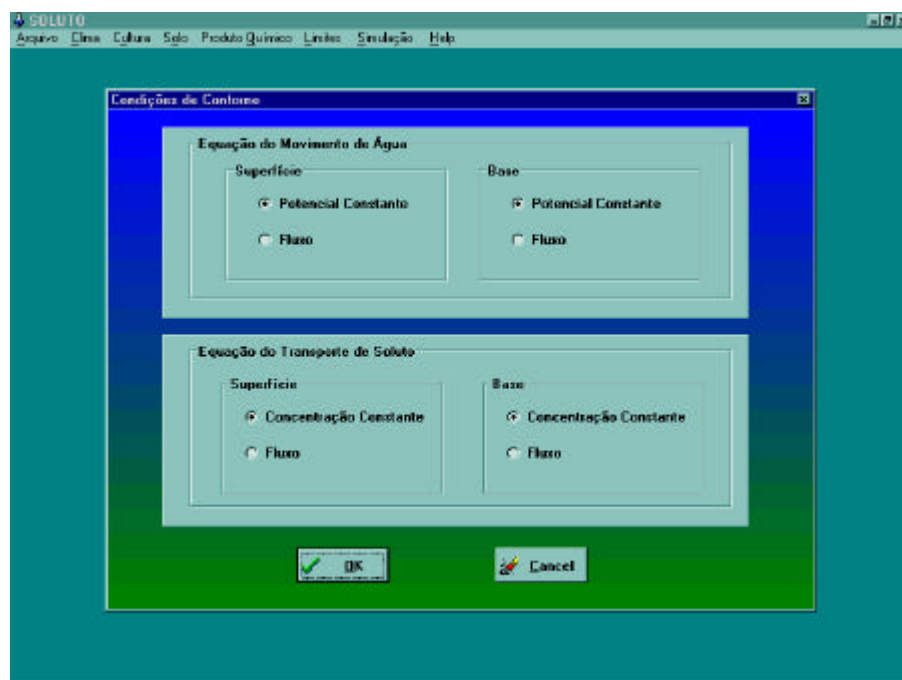


Figura 17 – Tela para seleção das condições de contorno do problema.

No módulo Simulação (Figura 18) é possível definir os parâmetros da simulação e optar em realizar a simulação na presença ou na ausência de culturas.

Ao clicar em Definir Parâmetros, será aberta a tela apresentada na Figura 19, na qual encontra-se a data do início e do fim do período de simulação; o intervalo de tempo para exibição dos resultados; a profundidade do perfil do solo a ser considerado na simulação; o delta Z (intervalo de profundidade) e o delta t. Para o delta t é possível escolher entre “delta t variável”, no qual, internamente, o modelo define o valor do mesmo a cada processo iterativo, e “delta t fixo”, quando o usuário estabelece seu valor.

Selecionando a opção “Simular considerando a ausência de culturas”, abre-se a tela apresentada na Figura 20, onde são especificados os valores das condições de contorno selecionadas anteriormente. Após a entrada destes valores, pressionando-se o botão ‘Ok”, inicia-se a simulação.

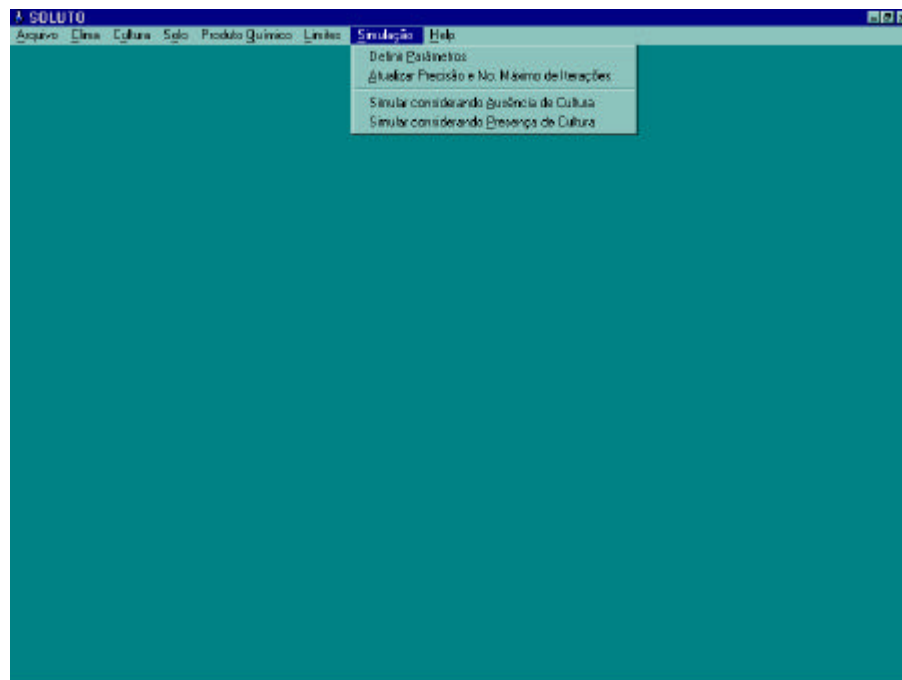


Figura 18 – Tela relativa ao módulo Simulação.

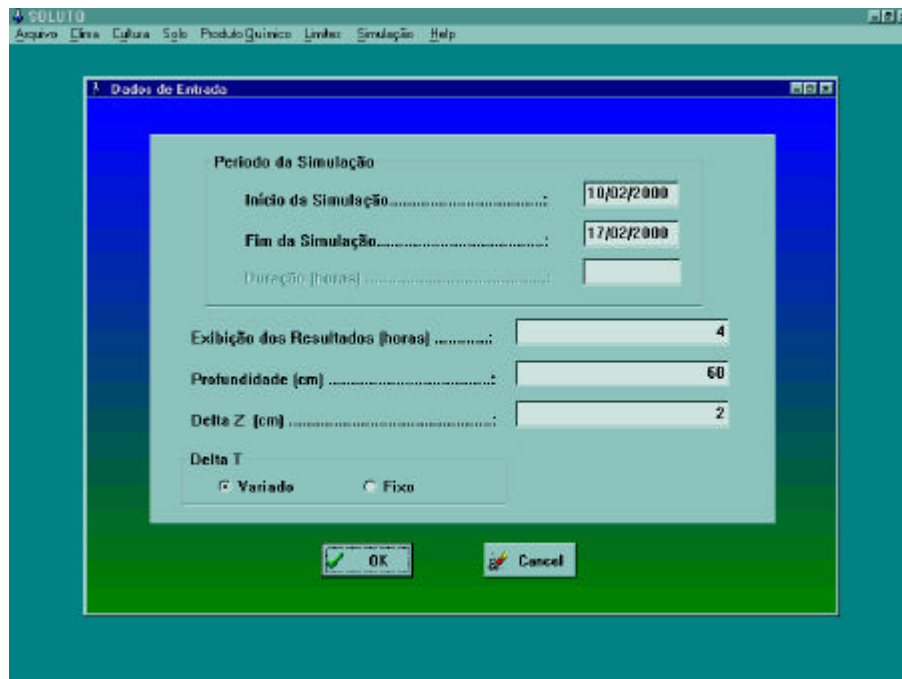


Figura 19 – Tela para a entrada de dados relativos ao período de simulação, profundidade do solo a ser considerada e os respectivos delta t e delta z.

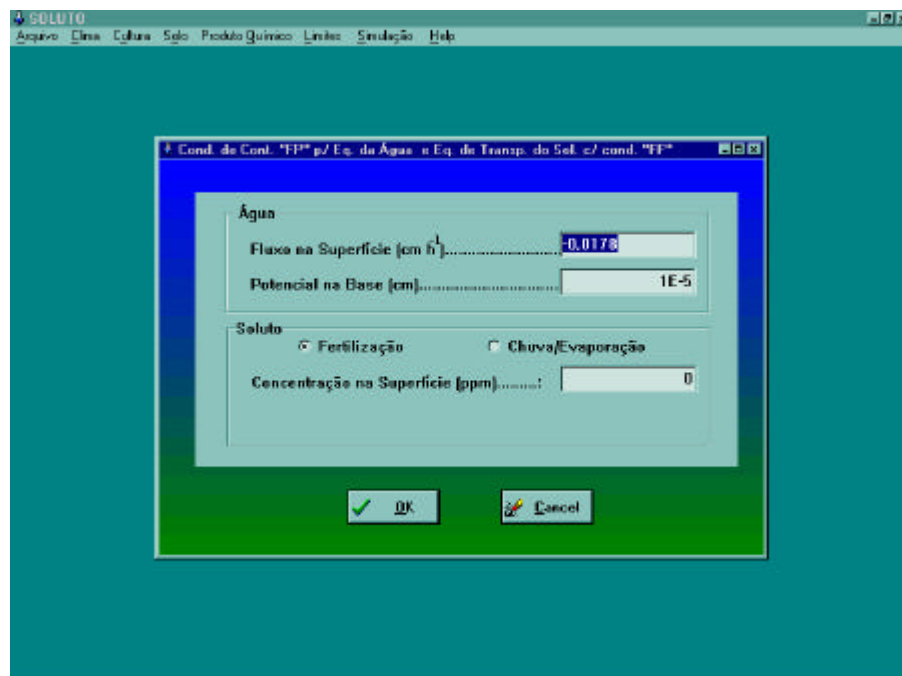


Figura 20 – Entrada dos valores das condições de contorno para o caso de simulação sem planta.

Para a opção “Simular considerando a presença de culturas”, o procedimento é semelhante ao discutido anteriormente, no entanto, com uma etapa adicional referente ao cálculo da evapotranspiração (Figura 21). Nesta tela, seleciona-se o método a ser utilizado no cálculo da evapotranspiração de referência da cultura. É permitido ao usuário modificar os dados de latitude, altitude e a constante psicrométrica. Após o cálculo da evapotranspiração a mesma é subdividida em evaporação direta na superfície do solo e transpiração da planta. A primeira é estabelecida como fluxo na superfície e a segunda é considerada no modelo de extração de água do perfil do solo.

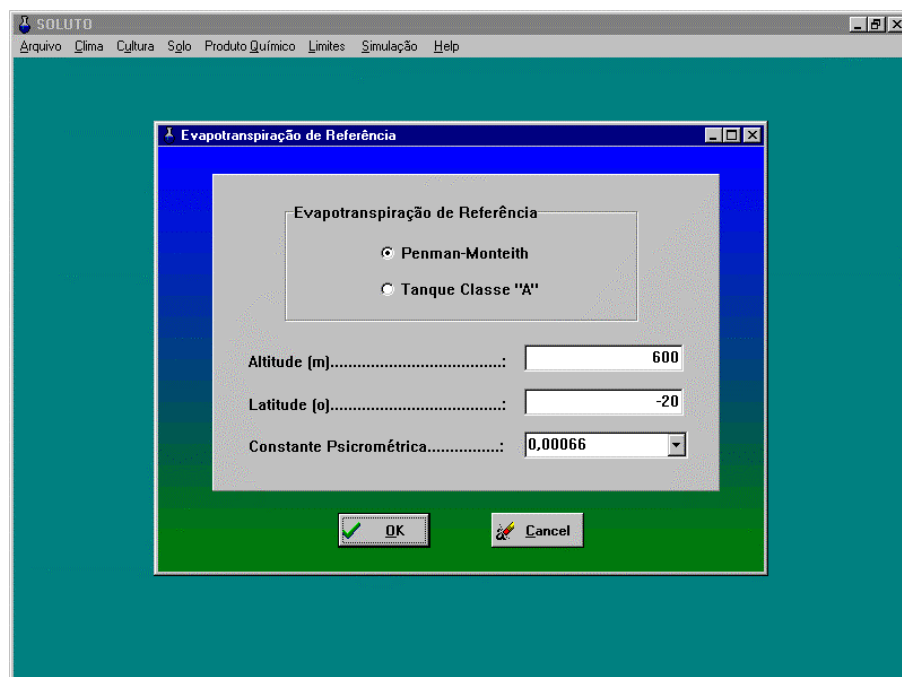


Figura 21 – Tela para seleção do método a ser utilizado para o cálculo da evapotranspiração.

A Figura 22 apresenta a tela para visualização dos resultados de simulação no modelo SIMASS-C. Clicando-se nos botões da direita ou esquerda do nome, o usuário poderá visualizar, através de quadros e gráficos, os valores simulados do potencial matricial, umidade, fluxo, concentração e parâmetros da cultura. Para a concentração, o modelo permite também visualizar a curva de eluição do produto.

Nos gráficos, para facilitar a visualização dos resultados, é permitido apenas verificar o comportamento dos parâmetros estudados para as condições iniciais, finais, e à 25%, 50% e 75% do período de simulação. Nos quadros, porém, são exibidos todos os resultados gerados pelo modelo, considerando o intervalo de exibição especificado pelo usuário.

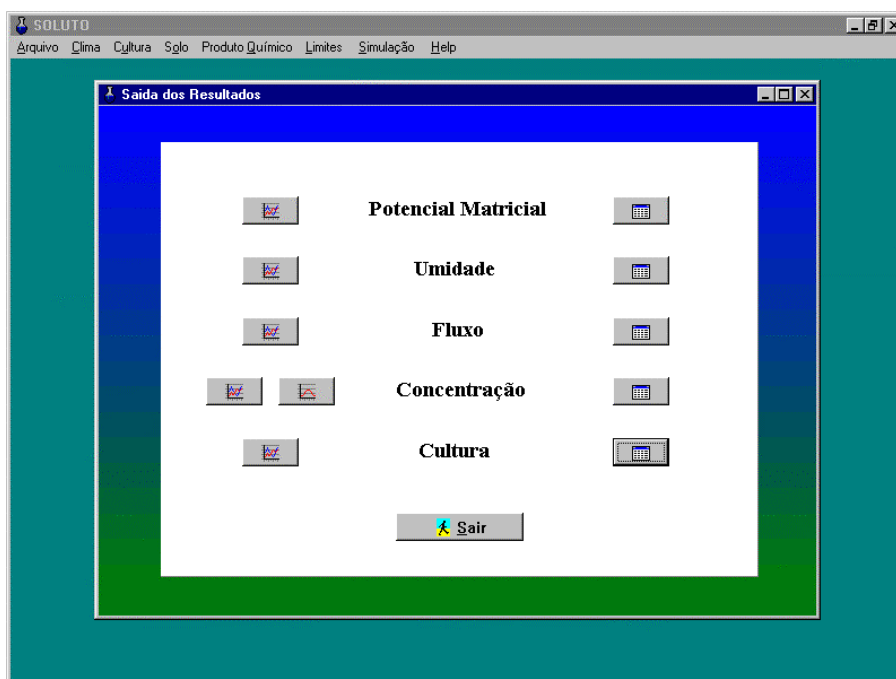


Figura 22 – Tela para exibição dos resultados simulados pelo modelo através de quadros ou gráficos.

Nas Figuras 23 a 28 são apresentados os resultados de simulação do modelo SIMASS-C para diferentes cenários. As simulações foram realizadas utilizando-se as características do solo observadas no ensaio experimental e apresentadas no tópico Material e Métodos, e tiveram o intuito de verificar se os dados de saída do modelo eram compatíveis com a realidade física dos problemas simulados.

Primeiro cenário. Considerou-se uma coluna de solo saturado, com concentração inicial de nitrato igual a zero, na qual manteve-se, durante um período de 24 horas, uma lâmina constante de 1 cm, na superfície do solo, de uma solução de nitrato de concentração igual a 10 ppm. Os valores utilizados para o coeficiente de partição de nitrato no solo e o de difusão de nitrato em

água foram de $0,414 \text{ cm}^3 \text{ g}^{-1}$ e $0,0684 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$, obtidos por COSTA (1998) e SOMMA et al. (1998), respectivamente. Nesta simulação objetivou-se verificar o comportamento do modelo em simular a curva de eluição do nitrato e a sua distribuição no perfil do solo.

Analisando as Figuras 23 e 24 podemos verificar que os resultados obtidos representam a realidade física do problema. Na Figura 23, como era esperado, a aplicação de nitrato na extremidade superior da coluna de solo faz com que haja o aumento da concentração de nitrato no perfil do solo com o decorrer do tempo. Já na Figura 24, analisando o formato da curva de eluição, observa-se que ela apresenta o formato sigmoidal, característico de produtos pouco interativos com o solo, como é o caso do nitrato. O comportamento destas curvas foram analisadas com aquelas obtidas utilizando-se o modelo SIMASS (COSTA et al., 1998), encontrando-se uma boa concordância entre os resultados dos dois modelos.

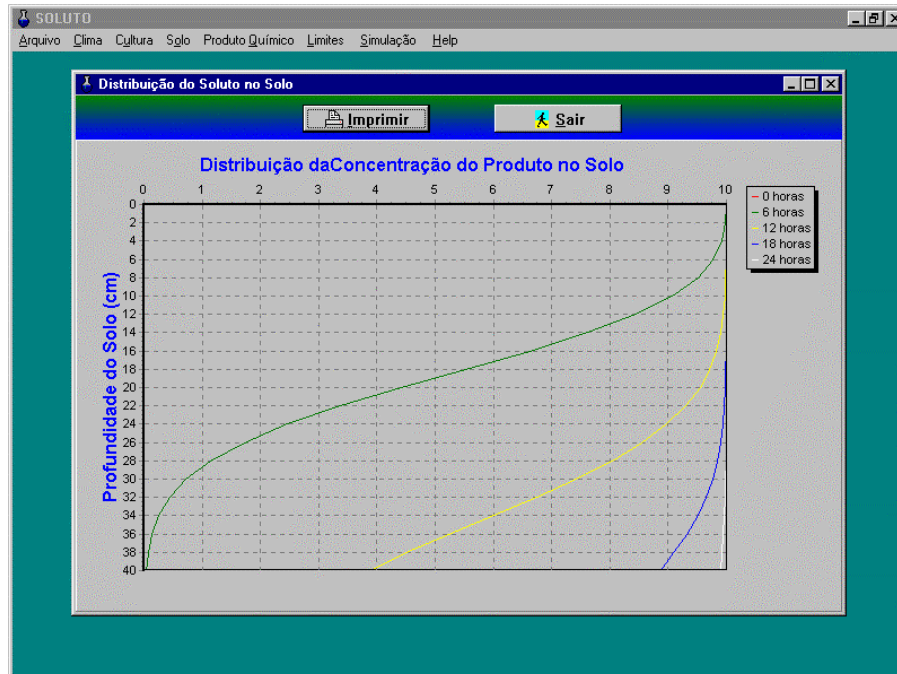


Figura 23 – Distribuição de nitrato no perfil de uma coluna de solo saturado.

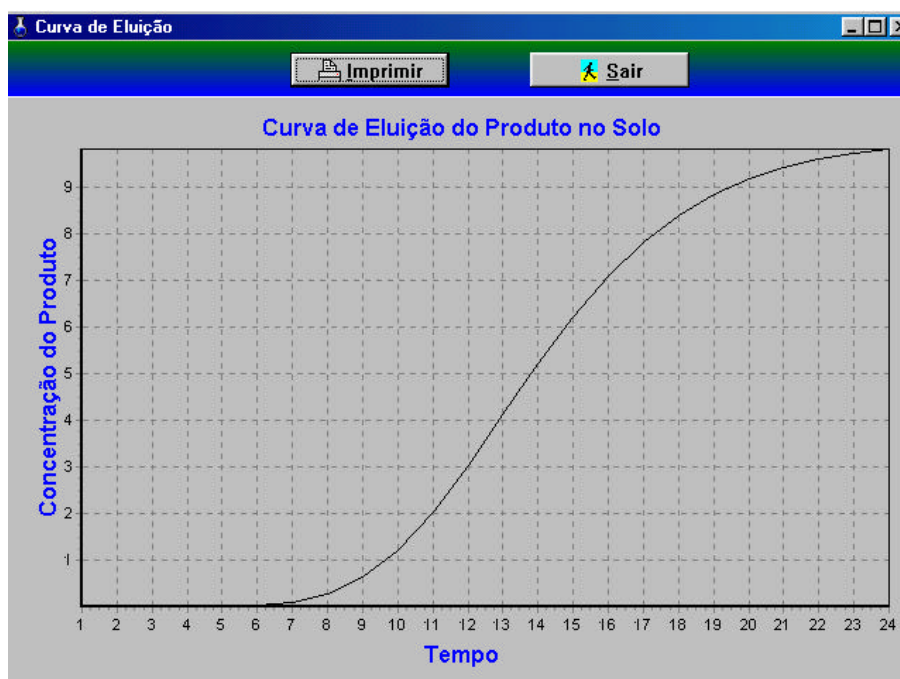


Figura 24 – Curva de eluição simulada de nitrato na base de uma coluna de solo saturado.

Segundo Cenário. Solo inicialmente não saturado com teor de umidade inicial de 34 % (em base volume) e a concentração de nitrato inicial zero. Partindo-se desta condição, a distribuição do potencial matricial, da umidade e da concentração de nitrato foi simulada considerando-se a aplicação de nitrogênio, na forma de nitrato, na água de irrigação. Características da irrigação: intensidade de aplicação de 10 mm/h durante 4 horas. Simulou-se a distribuição de nitrato no solo considerando-se as seguintes formas de aplicação:

- 1- O nitrato foi aplicado durante todo o tempo de irrigação, 4 horas.
- 2- Irrigou-se durante uma hora, aplicou-se o nitrato durante a segunda hora de irrigação e irrigou-se por mais duas horas.
- 3- Irrigou-se durante duas horas, aplicou-se nitrato durante a terceira hora de irrigação e irrigou-se por mais uma hora.

No primeiro caso, a concentração de nitrato na água de irrigação foi 50 ppm enquanto que para os dois outros a concentração foi de 200 ppm, de

modo a se aplicar a mesma quantidade de nitrato em todos os casos. Considerou-se, na simulação, uma camada de solo de 40 cm de profundidade.

Os resultados desta simulação são apresentados nas Figuras 25 a 28. Na Figura 25 vê-se as curvas de distribuição de umidade durante diferentes tempos de irrigação. Nota-se que a frente de umedecimento atinge, ao final do período de irrigação (curva em branco), a profundidade aproximada de 28 cm.

É interessante, nesse momento, tecer alguns comentários sobre a possibilidade oferecida pelo modelo SIMASS-C em acompanhar a dinâmica do armazenamento de água no solo. Considerados os teores de umidade inicial e a umidade de capacidade de campo, se fossem utilizados os conceitos tradicionais de irrigação, a profundidade do solo umedecida, após a aplicação da lâmina de irrigação, seria de 44,4 cm, bem superior aos 28 cm simulados. O modelo SIMASS-C permite, portanto, acompanhar o processo de redistribuição de água no solo, oferecendo a oportunidade de estabelecer estratégias para o uso racional da água. Integrando, na Figura 25, a área correspondente ao perfil de umidade após a irrigação, obtém-se o valor aproximado da lâmina de irrigação de 40 mm.

Nas Figuras 26 a 28 são apresentadas as curvas de distribuição de nitrato no solo a diferentes tempos de irrigação. Para efeito de comparação das diferentes formas de aplicação do nitrogênio, deve-se analisar a curva correspondente ao final do período de irrigação (curva em branco). Uma primeira observação a ser feita é quanto a profundidade máxima atingida pelo nitrato. Quando se aplicou o nitrato durante toda a irrigação o nitrato atingiu a maior profundidade, aproximadamente 16 cm, diminuindo para 14 cm e 12 cm nos casos 2 e 3, respectivamente.

Outro aspecto importante é quanto ao perfil de distribuição do nitrato. No primeiro caso houve uma distribuição mais superficial, ocorrendo maior concentração na superfície. Nos outros casos a distribuição adquiriu uma forma de “sino”, ocorrendo maior concentração do fertilizante na profundidade de 4 cm. O resultado desta simulação demonstra a potencialidade do modelo em termos de se escolher o melhor momento da irrigação a se fazer a aplicação de nitrogênio no solo, visando deslocar o mesmo até a região de concentração das raízes das plantas.

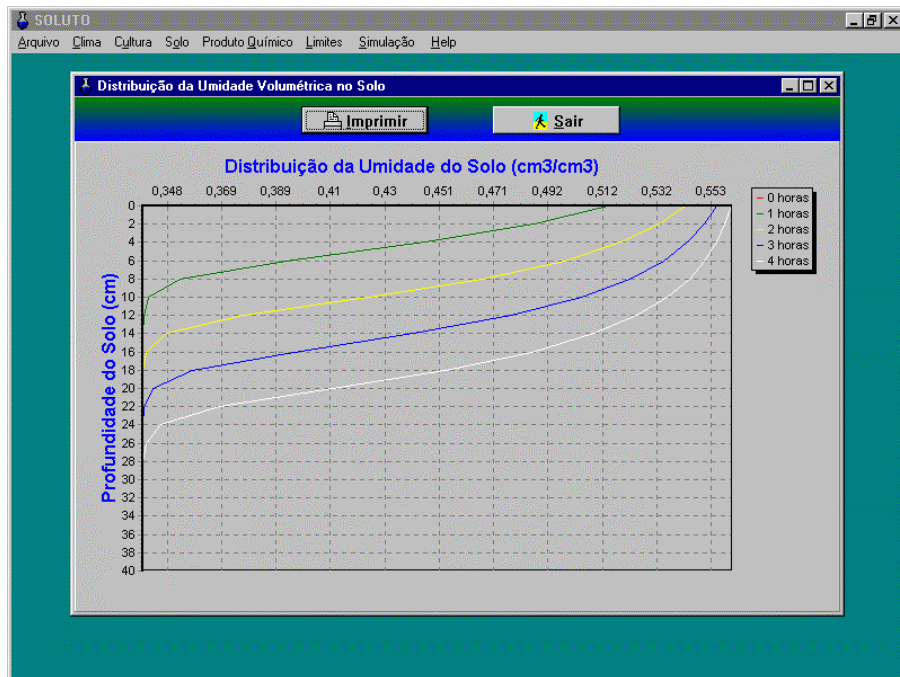


Figura 25 – Perfil de umidade do solo em diferentes tempos de irrigação

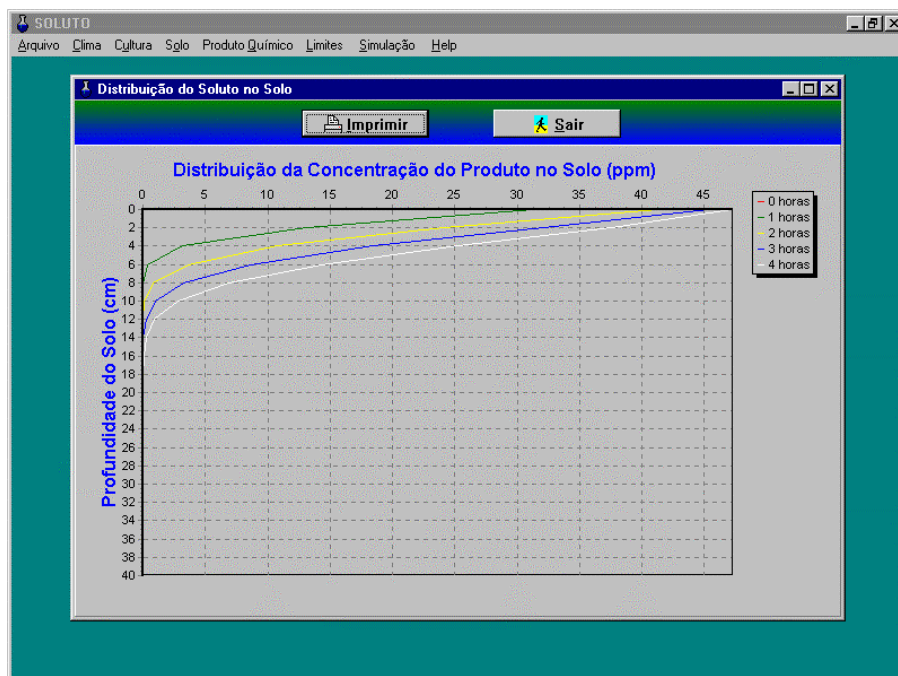


Figura 26 – Distribuição de nitrato quando aplicado durante todo o período de irrigação.

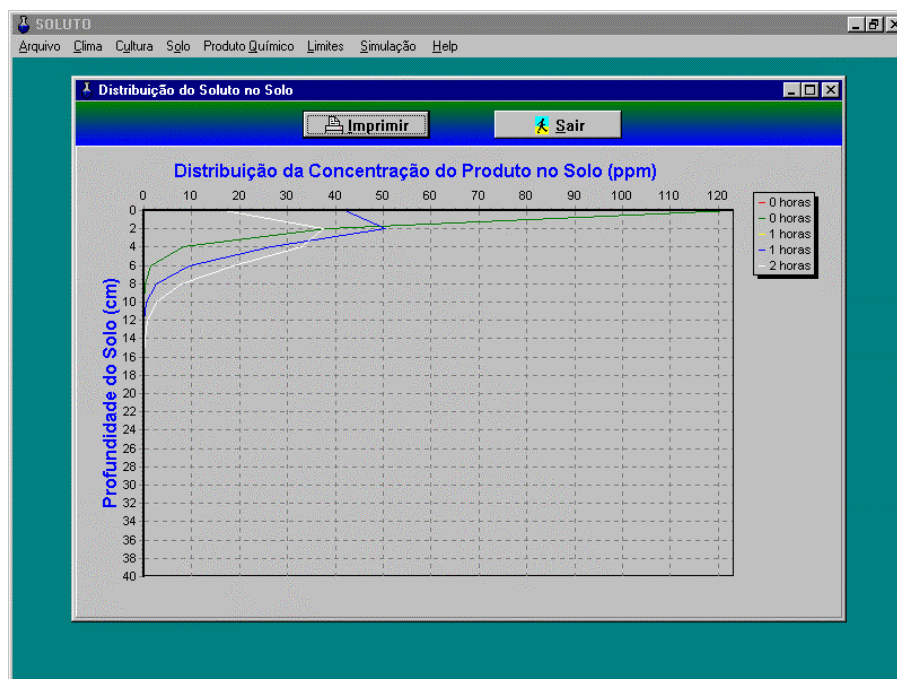


Figura 27 – Distribuição de nitrato quando aplicado durante a segunda hora do período de irrigação.

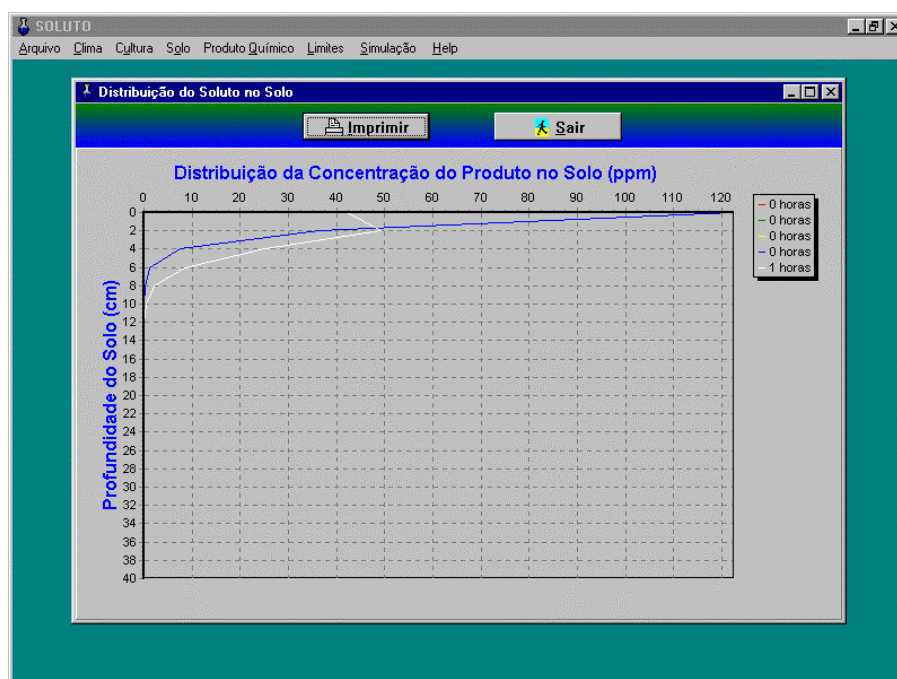


Figura 28 – Distribuição de nitrato quando aplicado durante a terceira hora do período de irrigação.

4.2 Teste do Modelo SIMASS-C com colunas de solo

O modelo SIMASS-C foi testado comparando-se os valores simulados pelo modelo com os valores obtidos em um experimento com a cultura do milho, em colunas de solo, cuja as características físico-hídricas do material solo usado no experimento como a metodologia empregada foram descritos anteriormente no tópico Material e Métodos. O coeficiente de partição de nitrato no solo e o de difusão de nitrato em água, os quais foram obtidos por COSTA (1998) e SOMMA et al. (1998), respectivamente.

No Quadro 2 estão apresentadas as características relacionadas aos aspectos fenotípicos da cultura de milho. Os parâmetros que descrevem o índice de área foliar foram obtidos de MANTOVANI (1993), uma vez que a duração do experimento não foi suficiente para obter estes parâmetros. Já os valores utilizados para o sistema radicular da cultura foram obtidos experimentalmente.

Quadro 2 - Características fenotípicas da cultura.

Parâmetros	Valor
Índice de Área Foliar	
Área foliar máxima (A_0 , $\text{cm}^2 \text{ planta}^{-1}$)	1307
Temperatura basal ($^{\circ}\text{C}$)	5
Densidade de plantio (PP, planta m^{-2})	40
Parâmetro “b”	12,52
Parâmetro “k”	0,0077
Sistema radicular	
Período de crescimento das raízes (t_m , dias)	20
Profundidade de plantio (RD_0 , cm)	3
Profundidade máxima das raízes (RD_m , cm)	40
Parâmetro “a”	0,326
Parâmetro “b”	-0,1

As Figuras 29 e 30 apresentam, respectivamente, o comportamento observado para a densidade e o crescimento radicular do milho cultivado nas

colunas de solo. Percebe-se que houve um melhor ajuste dos modelos sigmoidal e exponencial para o crescimento e densidade radicular, justificando, dessa forma, a utilização dos mesmos no teste do modelo SIMASS-C.

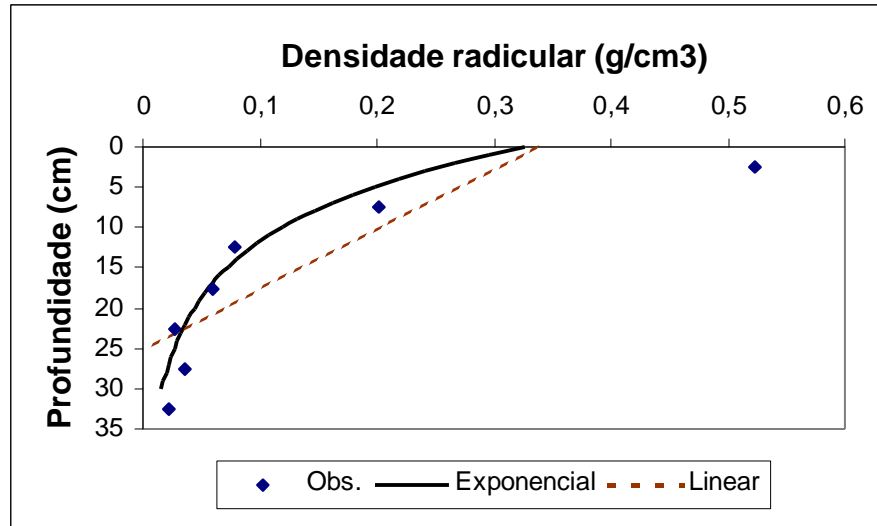


Figura 29 – Densidade radicular observado para a cultura do milho e representação dos modelos exponencial (equação 3.33) e linear (equação 3.34).

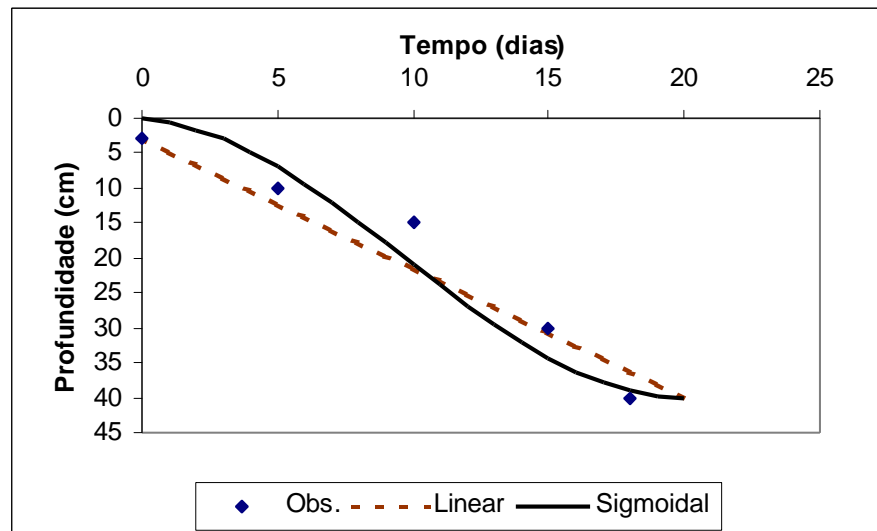


Figura 30 – Crescimento radicular observado para a cultura do milho e representação dos modelos linear (equação 3.35) e sigmoidal (equação 3.36).

Os valores da evapotranspiração real da cultura e as lâminas de irrigação aplicadas durante o ensaio experimental estão apresentados na Figura 31. As três lâminas de irrigação, com magnitude de 12,22 mm, 20,37 mm e 61,11 mm foram aplicadas, respectivamente, em 28/11, 5/12 e 11/12. O valor apresentado para a terceira irrigação refere-se ao somatório da lâmina de irrigação com uma precipitação de aproximadamente 50 mm, quando procurou-se promover a drenagem das colunas de solo.

As Figuras 32 a 40 representam os perfis de umidade do solo simulados pelo modelo SIMASS-C e observados experimentalmente ao longo do período de desenvolvimento da cultura. As simulações foram realizadas considerando condições de contorno tipo fluxo, tanto na superfície como na base da coluna. No caso das Figuras 37 a 40, são apresentados, também, os resultados obtidos quando se considerou a presença de lençol freático na base da coluna (potencial matricial constante e igual a zero). Para avaliar a performance do modelo, nos dados observados foram inseridos os intervalos de confiança, ao nível de probabilidade de 90%, semelhante aos trabalhos de DOU e FOX (1995), JOHNSON et al. (1999). Seguindo-se as recomendações de LIWANG et al. (1998), a predição do modelo é considerada precisa se os valores simulados estiverem dentro da faixa de variação do intervalo de confiança.

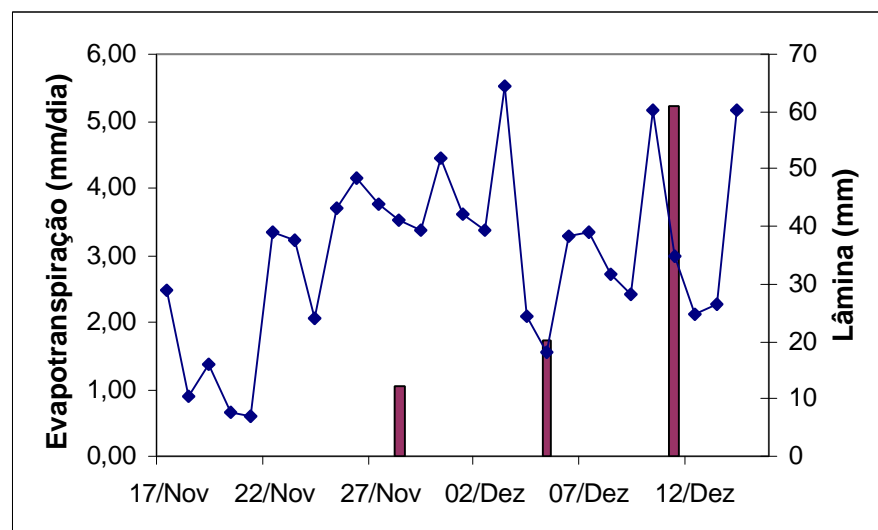


Figura 31 – Evapotranspiração real (mm/dia) e lâmina de irrigação (mm) aplicada ao longo do período de desenvolvimento da cultura.

Analisando as figuras 32 a 36, verifica-se que, no geral, os valores simulados situaram-se dentro do intervalo de confiança, indicando, de acordo com LIWANG et al. (1998), que o modelo foi preciso em simular a umidade do solo.

Desvios dos valores experimentais foram verificados nos dias 11, 12, 13 e 14/12, correspondentes aos períodos de 12, 24, 48 e 72 horas após a aplicação da lâmina excessiva de água, Figuras 37, 38, 39 e 40, respectivamente. A explicação para o menor sucesso do modelo está provavelmente relacionada ao mal funcionamento dos drenos localizados na base das colunas, o que ocasionou um acúmulo de água nessa região. Os perfis de umidade observados no experimento, nesse período, são característicos da presença de lençol freático, tendo em vista que a umidade armazenada, em todos perfis, permaneceu aproximadamente constante, mostrando que transpiração das plantas e a evaporação no solo foram balanceadas pela ascensão capilar proveniente do acúmulo de água na base da coluna. Considerações semelhantes foram reportadas por WANG et. al. (1998).

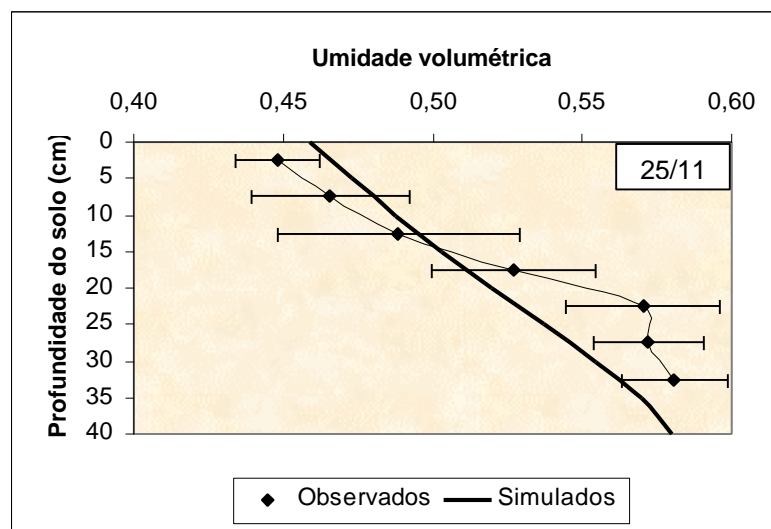


Figura 32 – Perfil de umidade do solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 25/11/2000, considerando fluxo na base da coluna ($\Delta z = 5$ cm e $\Delta t = 0,1$ horas).

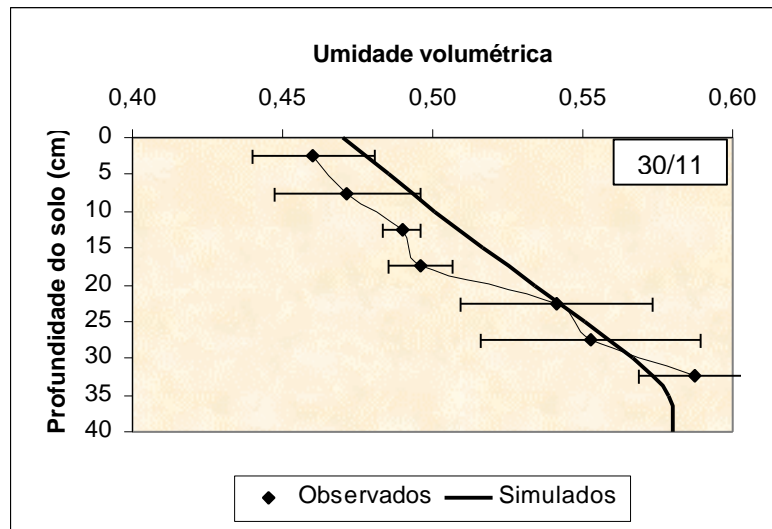


Figura 33 – Perfil de umidade do solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 30/11/2000, considerando fluxo na base da coluna ($\Delta z = 5$ cm e $\Delta t = 0,1$ horas).

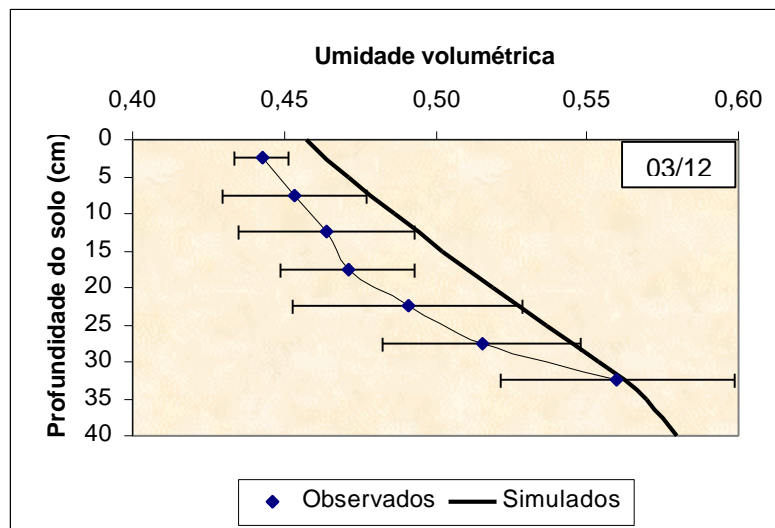


Figura 34 – Perfil de umidade do solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 03/12/2000, considerando fluxo na base da coluna ($\Delta z = 5$ cm e $\Delta t = 0,1$ horas).

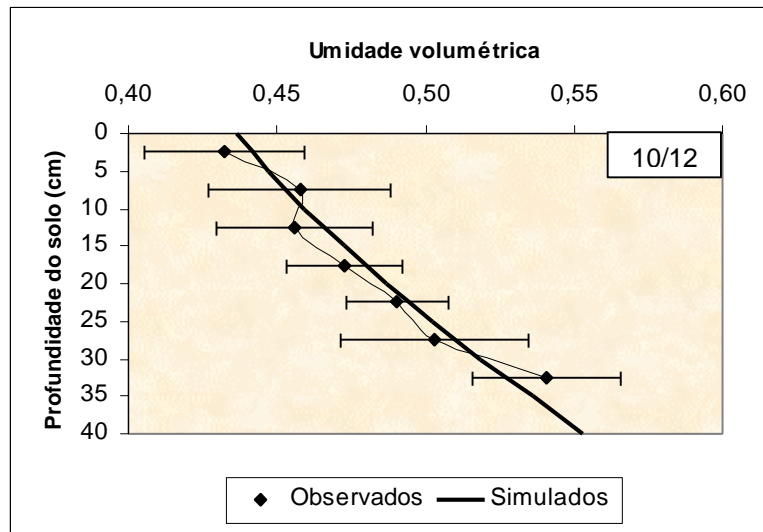


Figura 35 – Perfil de umidade do solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 10/12/2000, considerando fluxo na base da coluna ($\Delta z = 5 \text{ cm}$ e $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$).

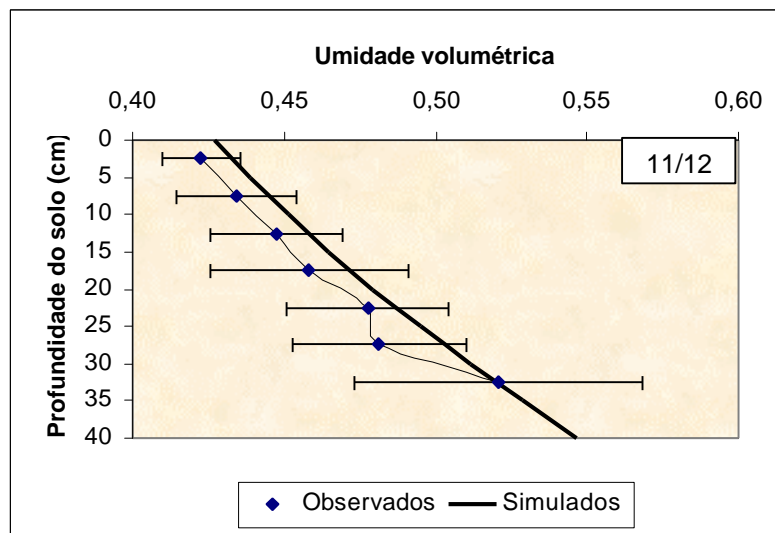


Figura 36 – Perfil de umidade do solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 11/12/2000, considerando fluxo na base da coluna ($\Delta z = 5 \text{ cm}$ e $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$).

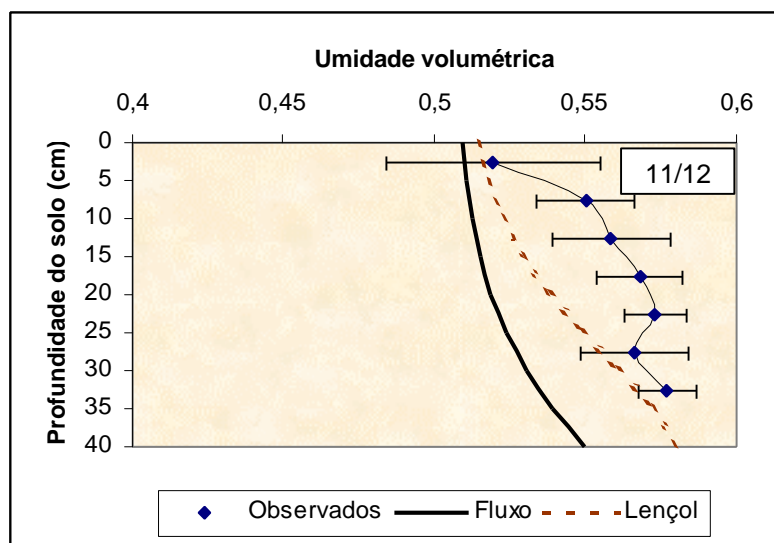


Figura 37 – Perfil de umidade do solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, 12 horas após a aplicação da lâmina de lixiviação, considerando fluxo (— Fluxo) ou lençol freático (--- Lençol) na base da coluna ($\Delta z = 5 \text{ cm}$ e $\Delta t = 0,1$ horas).

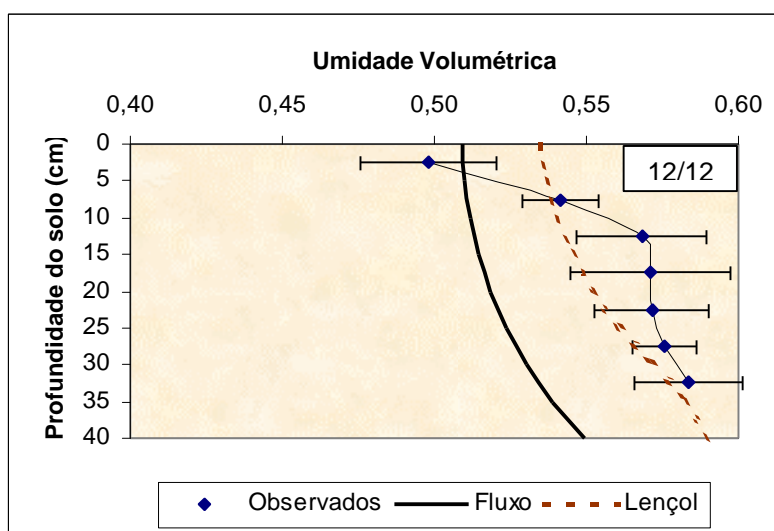


Figura 38 – Perfil de umidade do solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 12/12/2000, considerando fluxo (— Fluxo) ou lençol freático (--- Lençol) na base da coluna ($\Delta z = 5 \text{ cm}$ e $\Delta t = 0,1$ horas).

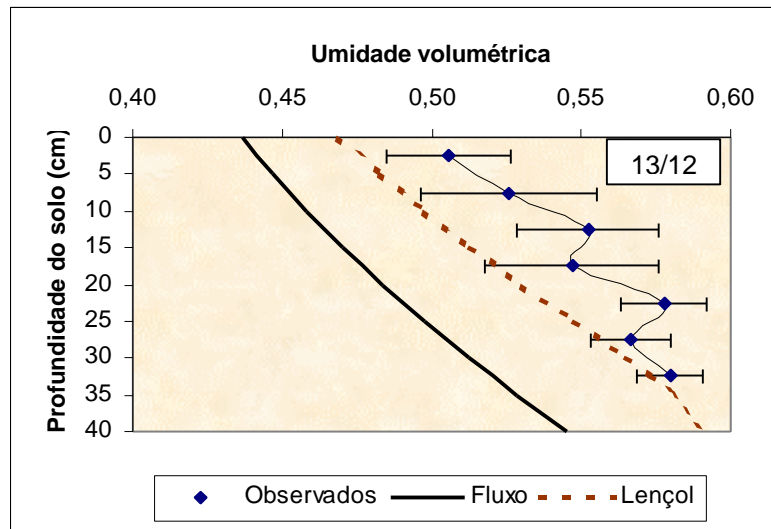


Figura 39 – Perfil de umidade do solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 13/12/2000, considerando fluxo (— Fluxo) ou lençol freático (- - - Lençol) na base da coluna ($\Delta z = 5 \text{ cm}$ e $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$).

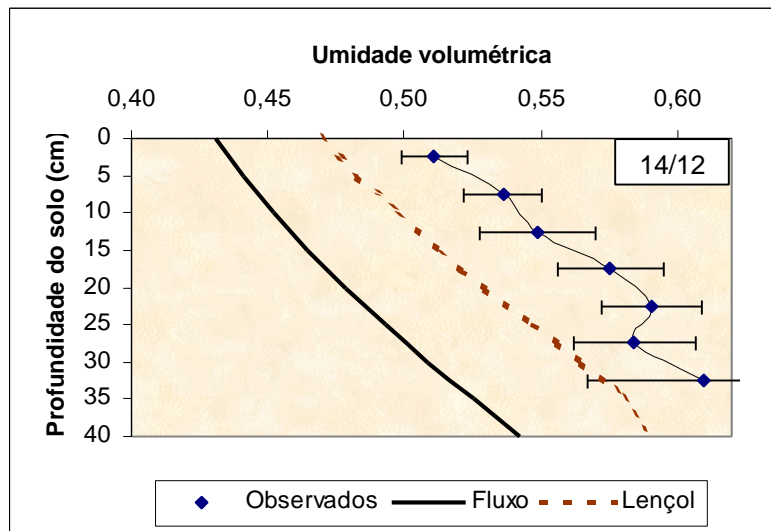


Figura 40 – Perfil de umidade do solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 14/12/2000, considerando fluxo (— Fluxo) ou lençol freático (- - - Lençol) na base da coluna ($\Delta z = 5 \text{ cm}$ e $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$).

Analisando, portanto, os perfis simulados considerando a presença de lençol freático na base da coluna (Figuras 37 a 40), verifica-se que a mudança na condição de contorno permitiu uma melhoria sensível nos resultados simulados. Uma análise mais minuciosa nas mesmas figuras, pode-se observar que, mesmo considerando a presença de lençol freático, os perfis de umidade estimados pelo modelo apresentaram pontos situados fora do intervalo de confiança das médias observadas. Uma das hipóteses para explicar esse comportamento diferenciado poderia estar relacionado à erros associados na medição dos parâmetros de entrada do modelo, provocados pela variabilidade apresentada nas colunas de solo, como justificado por TILLOTSON e WAGENET (1982). No entanto, parece ser mais aceitável que os desvios apresentados estejam relacionados com a falta de habilidade do modelo em estimar a ascensão capilar, proporcionando uma subestimativa do fluxo ascendente de água.

Nas Figuras 41 a 48 são apresentados os perfis de concentração de nitrato, simulados e observados, ao longo do ensaio experimental. Pode-se observar, para a maioria dos perfis apresentados, a proximidade entre as curvas simuladas pelo modelo e as obtidas experimentalmente, o que demonstra a habilidade do modelo SIMASS-C em descrever o comportamento de solutos no solo.

Maior divergência foi encontrada na camada superficial do solo, no entanto, a grande variabilidade encontrada nos resultados experimentais, representada pela alta magnitude do intervalo de confiança, impossibilita inferências mais conclusivas. Dificuldades semelhantes foram encontradas por CAMEIRA et al. (1998), LIWANG et al. (1998) e SAXTON et al. (1977), os quais atribuíram tais variações a erros relacionados com a densidade do sistema radicular e com a variabilidade do solo. Porém, qualitativamente, pode-se inferir que os resultados simulados pelo modelo acompanharam a tendência geral dos dados amostrados.

Nesse momento deve-se ressaltar que processos de natureza química e biológica do nitrogênio no solo, como a nitrificação, desnitrificação e mineralização, não foram consideradas no modelo SIMASS-C, o que pode ter causado a divergência apresentada na camada superficial do solo.

Nessas figuras são apresentados os perfis simulados considerando dois valores para o coeficiente de partição de nitrato no solo. O maior valor refere-se ao encontrado por COSTA (1998), o qual realizou seus ensaios experimentais no solo estudado. Já o menor valor foi obtido na literatura a partir do trabalho desenvolvido por JOHNSON et al. (1999). Essa medida teve o intuito de avaliar qual valor do coeficiente de partição proporcionaria maior aproximação dos resultados simulados aos dados experimentais e ao mesmo tempo analisar a sensibilidade do modelo a esse coeficiente, uma vez que resultados de pesquisas têm demonstrado a grande influência desse parâmetro no destino de solutos no solo.

Nas Figuras 45 a 48 são apresentados os perfis de concentração de nitrato após a aplicação de uma lâmina de água correspondente a uma precipitação de 50 mm. Analisando os perfis de concentração contidos nestas figuras, fica comprovada a baixa sorção deste fertilizante no solo, o qual foi facilmente lixiviado das camadas superficiais, com traços do produto atingindo a base da coluna, 12 horas após a aplicação da lâmina de precipitação. Estas observações corroboram com as considerações realizadas por SEREM et al. (1997), SPALDING e EXNER (1993) e VERMA et al. (1995) de que o nitrato é um dos principais poluentes originados das atividades agrícolas, podendo alterar drasticamente a qualidade da água dos aquíferos subterrâneos.

Nas mesmas figuras pode-se observar também que o modelo SIMASS-C, por acompanhar a dinâmica de nitrato no solo, mostrou-se eficientemente sensível ao transporte de soluto, apresentando pico de concentração de NO_3^- semelhante ao verificado experimentalmente nas colunas de solo.

4.3 Sensibilidade do Modelo SIMASS-C à variação de K_d

Para promover a completa análise de sensibilidade do modelo seria necessário investigar cada parâmetro separadamente, o que acarretaria esforços quase proibitivos. Desta forma, preferiu-se analisar apenas a resposta do modelo SIMASS-C ao coeficiente de partição, " K_d ", como já mencionado, um dos parâmetros de grande influência no transporte de solutos no solo.

Analisando as Figuras 45 a 48, verifica-se o comportamento diferenciado dos perfis de concentração de nitrato quando assumidos dois valores distintos

para o coeficiente de partição e mantidos os demais parâmetros de entrada constantes, o que demonstra a sensibilidade do modelo SIMASS-C a esse parâmetro. Como esperado, pequenos valores de “ K_d ”, proporcionaram rápido movimento de nitrato no perfil do solo, evidenciando menor interação do produto com o meio poroso.

A sensibilidade do modelo ao coeficiente de partição é pouco observada nas Figuras 41 a 44, onde os perfis de concentração de nitrato estão bem próximos para os valores de “ K_d ” estudados. A proximidade dos perfis era esperada, uma vez que não houve, nesse período, a aplicação de lâmina de lixiviação. Por outro lado, após a aplicação da lâmina de água correspondente a uma chuva de 50 mm, os perfis de concentração se tornam distanciados.

Esse comportamento diferenciado entre os perfis de concentração evidencia a forte influência que a componente convectiva apresenta sobre o movimento de solutos no solo quando a umidade do solo estava próxima à saturação. Após a aplicação da lâmina de lixiviação, o deslocamento de água e soluto se dá essencialmente por convecção.

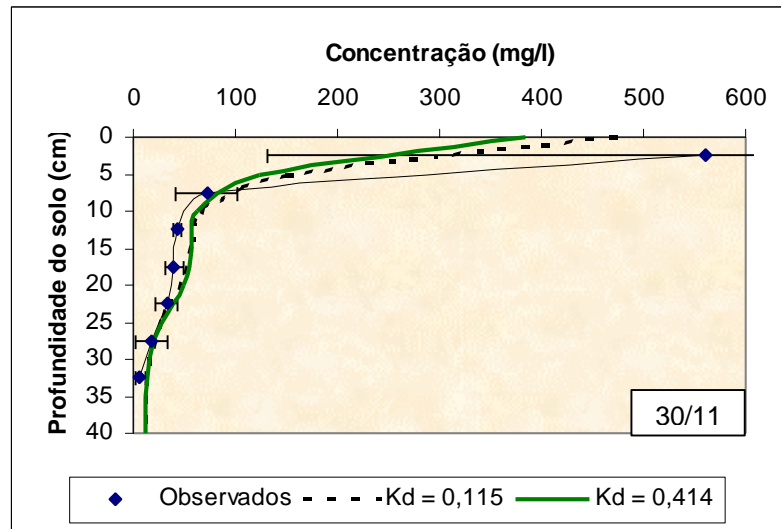


Figura 41 – Perfil da concentração de NO_3^- no solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 30/11/2000, considerando $\Delta z = 5 \text{ cm}$, $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$ e $D_0 = 0,0684 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$.

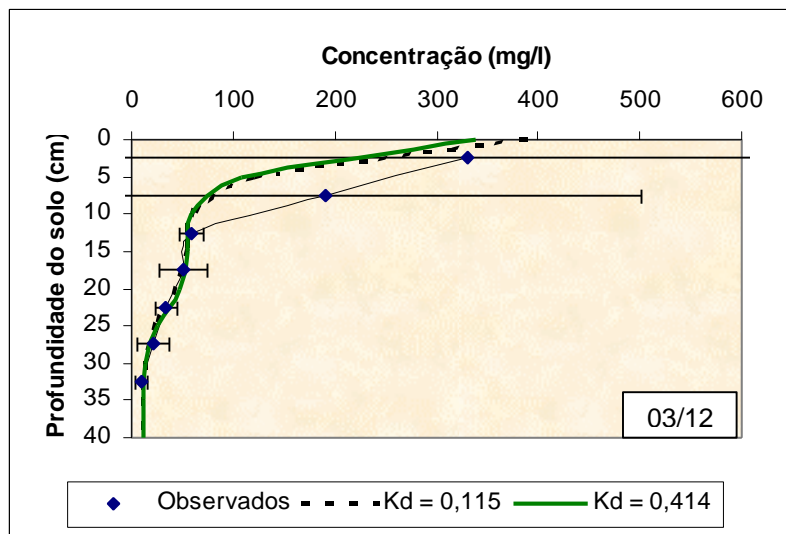


Figura 42 – Perfil da concentração de NO_3^- no solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 03/12/2000, considerando $\Delta z = 5 \text{ cm}$, $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$ e $D_0 = 0,0684 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$.

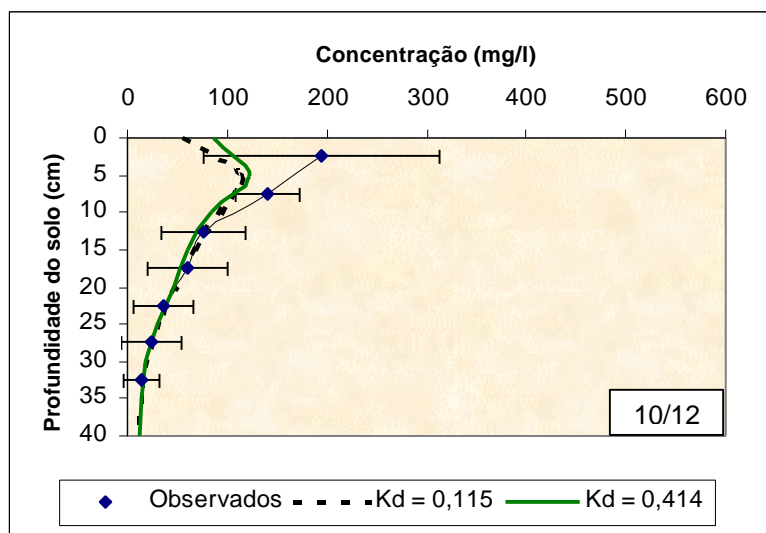


Figura 43 – Perfil da concentração de NO_3^- no solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 10/12/2000, considerando $\Delta z = 5 \text{ cm}$, $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$ e $D_0 = 0,0684 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$.

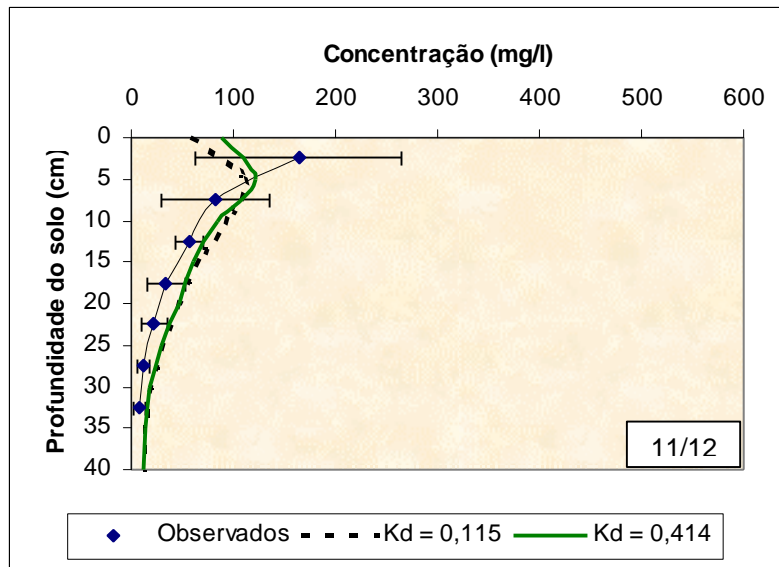


Figura 44 – Perfil da concentração de NO_3^- no solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 11/12/2000, considerando $\Delta z = 5 \text{ cm}$, $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$ e $D_0 = 0,0684 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$.

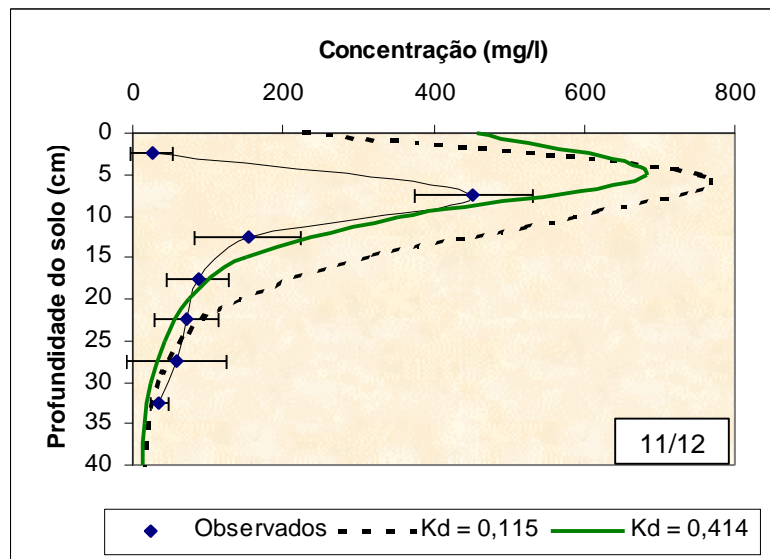


Figura 45 – Perfil da concentração de NO_3^- no solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, 12 horas após a aplicação da lâmina de lixiviação, considerando $\Delta z = 5 \text{ cm}$, $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$ e $D_0 = 0,0684 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$.

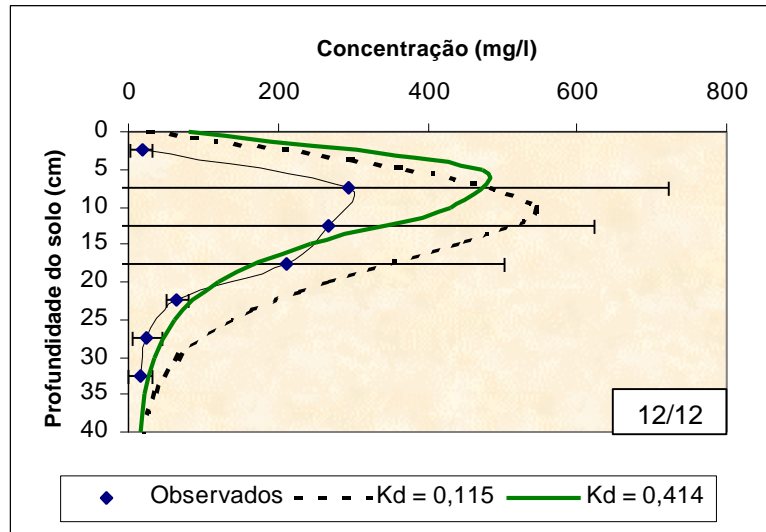


Figura 46 – Perfil da Concentração de NO_3^- no solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 12/12/2000, considerando $\Delta z = 5 \text{ cm}$, $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$ e $D_0 = 0,0684 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$.

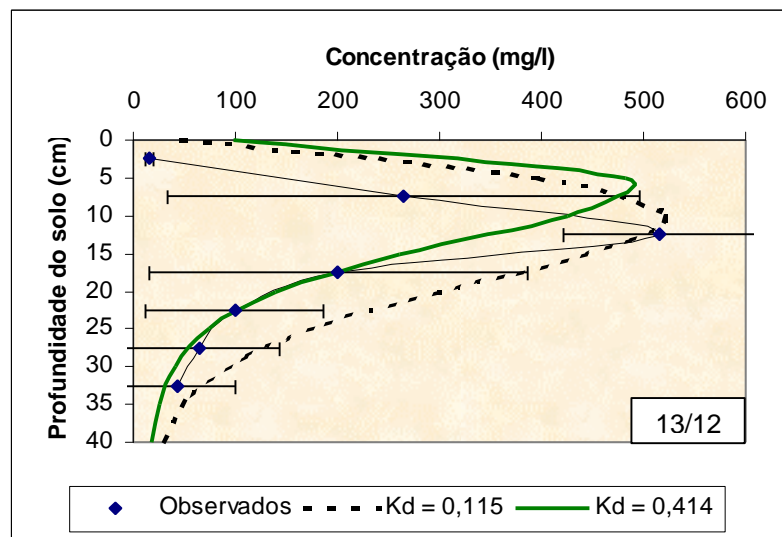


Figura 47 – Perfil da Concentração de NO_3^- no solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 13/12/2000, considerando $\Delta z = 5 \text{ cm}$, $\Delta t = 0,1 \text{ horas}$ e $D_0 = 0,0684 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$.

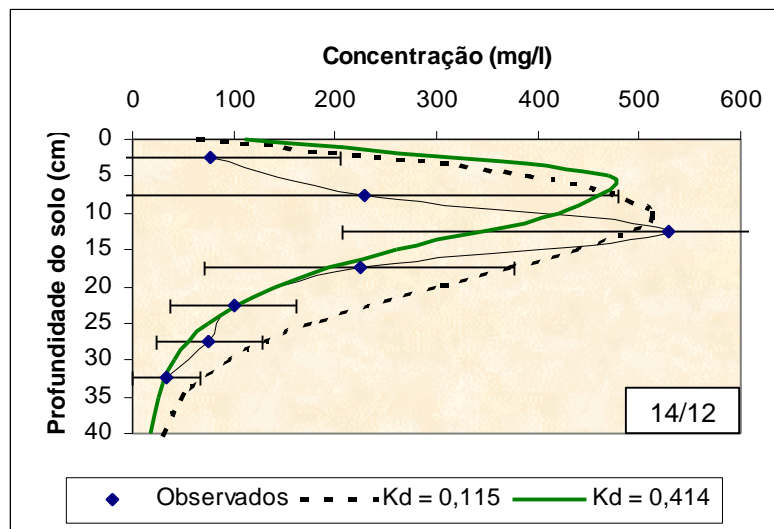


Figura 48 – Perfil da Concentração de NO³⁻ no solo, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 14/12/2000, considerando $\Delta z = 5$ cm, $\Delta t = 0,1$ horas e $D_0 = 0,0684$ cm² h⁻¹ em 14/12/2000.

Um aspecto bastante importante a ser considerado diz respeito à representatividade dos valores de “K_d” utilizados no modelo, tomando-se como referencial os valores observados nas amostras de solo. As melhores simulações obtidas com K_d = 0,414 confirmam os resultados obtidos por COSTA (1998) para o solo estudado, evidenciando diferenças quanto a natureza química dos solos brasileiros. Os solos de regiões de clima tropical e subtropical, como os solos brasileiros, caracterizam-se pelo alto grau de intemperismo. De acordo com FONTES (1996), por serem solos intemperizados, a mineralogia da fração argila é dominada por minerais argilosos silicatados do tipo 1:1 e óxidos de Fe e Al.

De modo diferente das argilas silicatadas que apresentam predominantemente cargas negativas, os óxidos de Fe e Al podem apresentar cargas negativas ou positivas, de acordo com o pH do solo. Existe um valor de pH onde a quantidade de prótons adsorvidos gerando carga positiva é igual ao número de oxidrilas gerando carga negativa, portanto, a carga superficial do colóide torna-se igual a zero. Esse ponto recebe a denominação de Ponto de Carga Zero (PCZ).

De acordo com FONTES (1996), diferentes minerais do solo apresentam PCZ a diferentes concentrações de H^+ , ou seja, a diferentes pHs que variam de pH = 2,0 para alguns óxidos de Si e Mn até pH de 9 a 10 para alguns óxidos de Fe e Al. Assim, diz-se que os minerais apresentam PCZs baixos ou altos conforme possuam pontos de carga zero a baixo pH ou a alto pH, respectivamente.

Considerando a retenção NO_3^- , pode-se inferir que solos que apresentam PCZ alto, como os latossolos e podzólicos, apresentam maior capacidade em reter esse ânion em sua fase sólida, uma vez que, em condições normais de cultivo, há a tendência de prevalecer o balanço de carga positivo nesses solos.

Esse comportamento particular demonstra que a determinação experimental dos parâmetros de transporte de solutos para solos brasileiros se torna parte essencial em estudos que visem descrever o transporte dessas substâncias por meio de modelos matemáticos, uma vez que influencia decisivamente nas simulações. A utilização do valor de “Kd”, encontrado por JOHNSON et al. (1999), ocasionou desvios apreciáveis em condições de elevada umidade no solo.

4.4 Análise Comparativa do Modelo SIMASS-C com o Modelo CXTFIT

De acordo com LEIJ et al. (1991), as soluções analíticas, apesar de estarem disponíveis para um número limitado de situações, apresentam-se como uma ferramenta útil para verificar as soluções numéricas de modelos de transporte de solutos no solo, uma vez que são consideradas, do ponto de vista matemático, soluções exatas das equações diferenciais parciais.

Nesse sentido, semelhante aos trabalhos de SULEKHA et al. (1998) e WANG et al. (1998), procurou-se testar a solução numérica e validar o código computacional do modelo SIMASS-C, por meio de três problemas testes, desenvolvidos a partir dos resultados de pesquisa de CORRÊA (1996), com o inseticida sulfona de aldicarbe. Os resultados das simulações obtidos com o SIMASS-C foram comparados com aqueles obtidos pela solução analítica apresentada por PARKER e van GENUCHTEN (1984) no modelo CXTFIT.

Nas Figuras 49 e 50 estão apresentadas as curvas de eluição do

inseticida sulfona de aldicarbe, em colunas de 40 cm de comprimento de solo saturado, para duas situações distintas. Na primeira, a curva de eluição foi construída a partir da aplicação de solução aquosa do inseticida durante todo o tempo de coleta do efluente. Na segunda, a curva de eluição foi obtida considerando a aplicação tipo pulso, quando a solução contendo o pesticida foi aplicada durante a metade do tempo de coleta e na outra metade foi aplicado somente água

A Figura 51 apresenta os perfis de concentração de sulfona de aldicarbe para os tempos de 60, 120 e 180 minutos após o início da aplicação do produto, considerando a primeira situação.

Diferente das outras simulações apresentadas, na análise do modelo SIMASS-C com a solução analítica, a malha de discretização foi diminuída, assumindo-se $\Delta z = 1$ cm. Tal procedimento foi adotado devido a importância do valor de Δz no resultado das simulações e no processo de convergência de soluções numéricas. De modo geral, quanto mais próximos estiverem os pontos da malha de discretização, mais próximos estarão os resultados obtidos por soluções numéricas daqueles obtidos por soluções analíticas. Procedimento semelhante foi adotado por SULEKHA et al. (1998) para análise do modelo numérico desenvolvido.

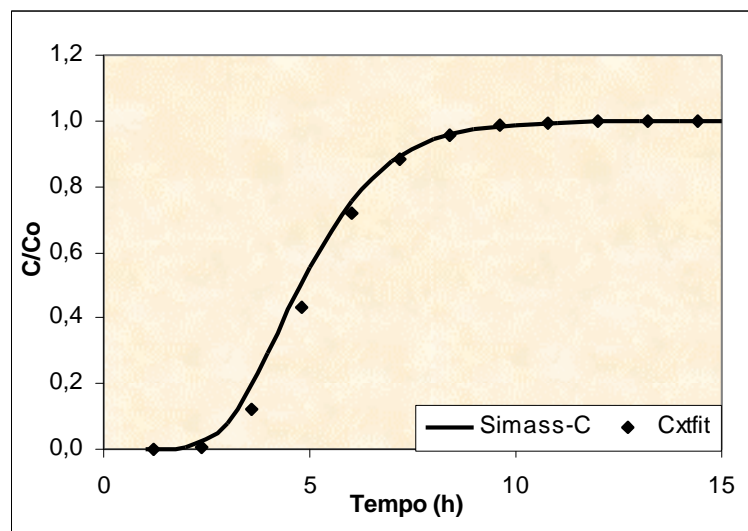


Figura 49 – Curvas de eluição do inseticida sulfona de aldicarbe calculadas pelos Modelos CXTFIT e SIMASS-C, considerando $\Delta t = 0,1$ horas, $\Delta z = 1$ cm, $v = 8,07$ cm h⁻¹, $D = 14,55$ cm² h⁻¹ e $K_d = 0,04299$.

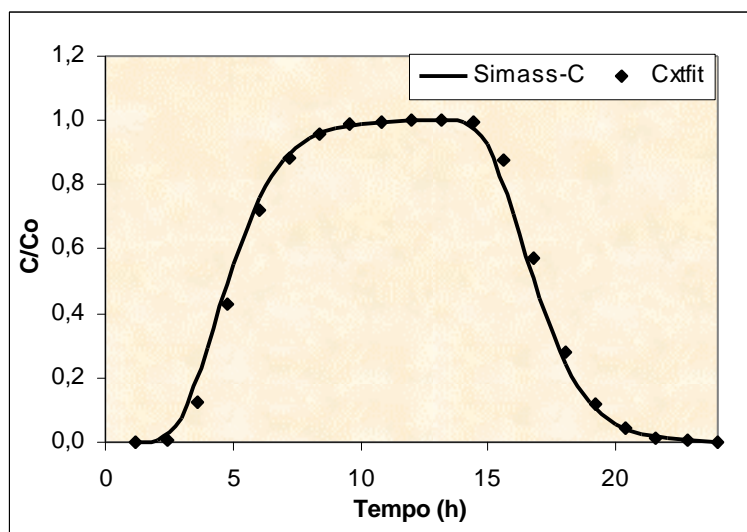


Figura 50 – Curvas de eluição do inseticida sulfona de aldicarbe para a aplicação tipo pulso calculadas pelos modelos CXTFIT e SIMASS-C, considerando $t_0 = 12$ horas, $\Delta t = 0,1$ horas, $\Delta z = 1$ cm, $v = 8,07 \text{ cm h}^{-1}$, $D = 14,55 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$ e $K_d = 0,04299$.

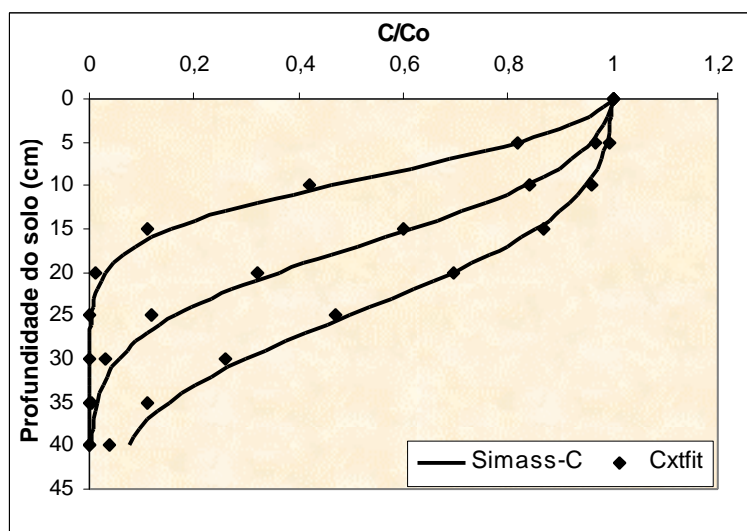


Figura 51 – Perfis de concentração do inseticida sulfona de aldicarbe observados pelo Modelo CXTFIT e SIMASS-C, considerando $\Delta t = 0,1$ horas, $\Delta z = 1$ cm, $v = 8,07 \text{ cm h}^{-1}$, $D = 14,55 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$ e $K_d =$

0,04299.

A análise das figuras permite observar, mais uma vez, que o modelo SIMASS-C apresentou ótimo desempenho, com curvas de eluição e perfis de concentração muito próximos dos fornecidos pela solução analítica do modelo CXTFIT.

Diante dos resultados apresentados na avaliação experimental, na análise de sensibilidade e nos ajustes com o modelo CXTFIT e considerando os vários fatores que influenciaram os dados amostrados tais como erros humanos e variabilidade das propriedades do solo e da planta, pode-se inferir que os resultados obtidos neste estudo indicam que o modelo SIMASS-C teve a capacidade de simular o transporte de água e nitrato no solo em condições de escoamento não saturado.

5 RESUMO E CONCLUSÕES

Com o desenvolvimento da computação e com o intuito de avaliar os riscos de contaminação provocados pelos produtos químicos, vários modelos foram desenvolvidos nos últimos anos. Esses modelos, além de minimizar tempo, trabalho e custos, podem ajudar na tomada de decisões para definir, quando, onde e como muitos produtos químicos podem ser aplicados no solo, assegurando que a água subterrânea não seja afetada.

O modelo SIMASS-C (**S**imulação do **M**ovimento de **Á**gua e **S**olutos no **S**olo considerando a presença de **C**ultura) foi desenvolvido para atender a essa proposta, e apresenta como objetivos principais: entender os processos que controlam a transferência e o destino de produtos químicos; avaliar dados experimentais e prever os impactos de curto e longo prazo de estratégias realizadas no manejo agrícola sobre a qualidade do solo e da água subterrânea.

Para simular o transporte de água e solutos no solo sob condições de escoamento não permanente e considerando a presença do sistema radicular da cultura foram utilizadas a equação de Richards, que permite obter a distribuição do potencial matricial, e a equação de transporte dispersivo-convectivo, que descreve a mobilidade de solutos no solo. Ambas as equações foram resolvidas numericamente pelo método de diferenças finitas. Após o desenvolvimento matemático, implementou-se um programa aplicativo, desenvolvido em linguagem Delphi, com compilador Turbo Delphi 3.0.

O modelo foi analisado inicialmente por meio de simulações em diferentes cenários, quando procurou-se verificar se os resultados gerados pelo modelo eram compatíveis com a realidade física dos problemas.

Posteriormente, o desempenho do modelo foi analisado a partir de ensaios experimentais, conduzidos em ambiente protegido, em colunas de solo, onde foi semeada a cultura do milho e aplicado o fertilizante KNO_3 .

Simulações adicionais foram realizadas com o intuito de analisar a sensibilidade do modelo ao coeficiente de partição de nitrato no solo. Por fim, baseado em resultados de pesquisa obtidos na literatura com o inseticida aldicarbe, analisou-se a proximidade dos resultados de simulação obtidos pelo modelo SIMASS-C com o modelo CXTFIT, desenvolvido por PARKER e van GENUCHTEN (1984), que representa a solução analítica da equação do transporte de solutos no solo.

Os resultados obtidos no presente trabalho permitiram as seguintes inferências conclusivas:

- As simulações realizadas em diferentes cenários físicos permitiram verificar que os resultados gerados pelo modelo SIMASS-C foram compatíveis com a realidade física dos problemas simulados.
- O modelo SIMASS-C apresentou-se flexível para simular o transporte de água e solutos no solo, demonstrando ser uma ferramenta útil para simular várias situações que poderão ser úteis em estudos de estratégias de manejo e prevenção da contaminação ambiental.
- Os modelos sigmoidal e exponencial apresentaram os melhores ajuste, respectivamente, para o crescimento e densidade radicular da cultura do milho, cultivado em colunas de solo homogêneo.
- O modelo SIMASS-C simulou, na maioria dos casos, adequadamente o transporte de água, mostrando-se hábil para prever a umidade no solo durante o período estudado.
- O modelo SIMASS-C foi capaz de simular o transporte de nitrato em condições de não saturação. Os perfis de concentração apresentado pelo modelo ficaram dentro da faixa de variação obtida nos ensaios experimentais.

- O modelo SIMASS-C simulou perfis de concentração e curvas de eluição de solutos bem próximas daquelas obtidas com o modelo CXTFIT, desenvolvido a partir de soluções analíticas do transporte de solutos no solo.
- Em condições de umidade próxima à saturação, o modelo apresentou-se sensível quanto ao valor do coeficiente de partição " K_d ", indicando a necessidade de estabelecer adequadamente o valor desse parâmetro de entrada. Já para condições de umidade próximas ou inferior à capacidade de campo não houve tanta influência.
- O efeito do movimento da água sobre o movimento de nitrato foi particularmente evidente, após a aplicação da lâmina de água correspondente a uma chuva de 50 mm.

6 RECOMENDAÇÕES

O modelo SIMASS-C é um produto de 4 anos de pesquisa, nos quais foram alocados esforços das diversas áreas de conhecimento que envolve o transporte de água e solutos no solo. Como todo método de predição, seria insensato considerar o trabalho finalizado, uma vez que simplificações foram necessárias no desenvolvimento do modelo. Portanto, revisões, melhoramentos e adições são sempre possíveis e desejáveis.

O autor sugere e recomenda que o modelo seja testado em condições mais representativas dos processos de transporte no campo incluindo: tratos culturais, densidade de plantio, heterogeneidade do perfil do solo, etc.

É recomendado também que sejam revistos e incorporados ao modelo outras equações matemáticas que representem a extração de água e soluto no solo, fazendo com que o modelo se torne mais versátil para simular a presença de uma sistema radicular ativo.

As simplificações relacionadas ao ciclo de nitrogênio no solo, estão sendo vencidas e serão apresentadas nas versões posteriores ao presente trabalho.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA:

- ALEF, K.; NANNIPIERI, P. **Methods in applied soil microbiology and biochemistry**. London: Academic Press. 1995.
- ALEXANDER, L.; SKAGSS, R.W. Predicting unsaturated hydraulic conductivity from the soil water characteristic. **Transaction of ASAE**, St Joseph, v.29, n.1, p.176-184, Jan./Feb. 1986.
- AZEVEDO, A.S.; KANWAR, R.S.; SINGH, P.; PEREIRA, L.S. Movement of NO₃-N and atrazine through soil columns as affected by lime application. **Transactions of the ASAE**, St. Joseph, v.39, n.3, p.937-945, May/June. 1996.
- BEAR, J. **Hydraulics of groundwater**. New York: McGraw-Hill Book Company. 1979. 569p.
- BEESE, F.; WIERENGA, P.J. Solute transport through soil with adsorption and root water uptake computed with a transient and a constant-flux model. **Soil Science**, Baltimore, v.129, n.4, p.245-252, Apr. 1980.
- BERGSTROM, L. JOHNSSON, H., TORTENSSON, G. Simulation of nitrogen dynamics using the SOILN model. **Fertilizer Research**, Halger, v.27, n.1, p.181-188, Jan./Mar. 1991.
- BERNARDO, S. **Manual de irrigação**. 6.ed. Viçosa, MG: Universidade Federal de Viçosa, 1996. 657p.
- BONATO, P. S.; LANCHOTE, V. L.; DREOSSI, S. A. C. High performance liquid chromatograph screening and gas chromatograph - mass spectrometry conformation of tebuthiuron residues em drinking water. **Journal of High Resolution Chromatograph**. n. 22, v. 4, p.239-241. 1999.

- BOS, M.G. Basics of groundwater flow. In: RITZEMA, H.P. **Drainage principles and applications**, 2 ed., Wageningen: International Institute for Land Reclamation and Improvement/ILRI, 1994. p.225-262
- BORG, H.; GRIMES, D.W. Depth development of roots with time: an empirical description. **Transaction of ASAE**, St. Joseph, v.29, n.1, p.194-197, Jan. 1986.
- BUTTERS, G.L.; JURY, W.A. Field scale transport of bromide in an unsaturated soil: 2. Dispersion modeling. **Water Resources Research**, Washington, v.25, p.1582-1588, 1989.
- CARDON, G.E.; LETEY, J. Plant water uptake terms evaluated for soil water and solute movement models. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.32, n.5, p.1876-1880, Sep./Oct. 1992.
- CLEARY, R.W. Qualidade da água subterrânea. In: BRANCO, S.M. *et al.*, **Hidrologia ambiental**, São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 1991. p.211-296.
- CAMEIRA, M.R.; SOUSA, P.L.; FARAHANI, H.J.; AHUJA, L.R.; PEREIRA, L.S. Evaluation of the RZWQM for simulation of water and nitrate movement in level-basin, fertigated maize. **Journal Agricultural Engineering Research**, v.69, p.331-341. 1998.
- CORRÊA, M.M. **Mobilidade e retenção do inseticida-nematicida sulfona de aldicarbe em colunas de solos de regiões produtoras de batata em Minas Gerais**. Lavras: Universidade Federal de Lavras. 1996. 76p. (Dissertação – Mestrado em Engenharia Agrícola).
- COSTA, S.N. **Desenvolvimento de um modelo computacional para simular o transporte de água e solutos no solo sob condições de escoamento não permanente na vertical**. Viçosa: Universidade Federal de Viçosa. 1998. 153p. (Tese - Doutorado em Engenharia Agrícola).
- DAAMEN, C.C.; XIAO, Z.; ROBINSON, J.A. Estimation of water-retention function using scaling theory and soil physical properties. **Soil Science Society America Journal**, Madison, v.54, n.1, p.8-13, 1990.
- DOU, Z.; FOX, R.H. Using NCSWAP to simulate seasonal nitrogen dynamics in soil and corn. **Plant and Soil**, Netherlands, v.177, p.235-247, 1995.
- EMPRESA BRASILEIRA DE PESQUISA AGROPECUÁRICA. **Manual de métodos de análise de solo**. Rio de Janeiro: Centro Nacional de Pesquisas de Solos/CNPS, 1997. 212p. (Documento 1).
- ENFIELD, C.G.; YATES, S.R. Organic chemical transport to groundwater. In: CHENG, H.H. **Pesticide in the soil environment: processes, impacts, and modeling**. Madison: Soil Science Society of America, 1990. p.271-302.

- FARIA, R.T. de; MADRAMOOTOO, C.A. Simulation of soil moisture profiles for wheat in Brazil. **Agricultural Water Manegement**, v.31, n.1, p.35-49. 1996.
- FERERES, E.; GOLDFIEN, R.E.; PRUIT, W.O. The irrigation management program: a new approach to computer assisted irrigation scheduling. In: **Proceedings...**, Irrigation Scheduling for Water and Energy Conservation, St. Joseph: ASAE, 1981. p.202-207.
- FONTES, M.P.F. **Caracterização da carga elétrica superficial de partículas do solo**. In: Congresso Latino Americano de Ciência do solo, XIII, Águas de Lindóia, 1996.
- GEELHOED, J.S.; MOUS, S.L.J.; FINDENEGG, G.R. Modeling zero sink nutrient uptake by roots with root hairs from soil: comparison of two models. **Soil Science**, Baltimore , v.162, n.8, p.544-553, Aug. 1997.
- GERALD, C.F.; WHEATLEY, P.O. **Applied numerical analysis**. 3.ed. Massachusetts: Assison-Wesley Publishing Company, 1984. 579p.
- GERWITZ, A.; PAGE, E.R. An empirical mathematical model to describe plant root systems. **Journal Applied Ecology**, v.11, p.773-781, 1974.
- GISH, T.J.; HELLING, C.S. and MOJASIVIC, M. Preferential moviment of Atrazine and Cyanazine under field conditions. **Transactions of the ASAE**, St Joseph, v.34, n.4, p.1699-1705, july-august, 1991.
- GREEN, R.E. and KARICKHOFF S.W. Sorption estimates for modeling. In: CHENG, H.H.; BAILEY, G.W.; GREEN, R.E. and SPENCER, W.F. (ed.). **Pesticides in the soil environment: processes, impacts, and modeling**, Madison: Soil Science Society of America Inc., 1990. p.79-102.
- HILLEL, D. **Soil and water: physical principles and processes**. New York: Academic Press, 1971. 409p.
- HILLEL, D. **Introduction to soil physics**. Orlando: Academic Press. 1982. 364p.
- HINZ, C.; GASTON, L.A.; SELIM, H.M. Effect of sorption isotherm type on predictions of solute mobility in soil. **Water Resources Research**, Washington, v.30, n.11, p.3013-3021, Nov. 1994.
- IWATA, S. TABUCHI, T.; WARKENTIN, B.P. **Soil-water interactions**, 2.ed., New York: Marcel Dekker, Inc., 1995. 440p.
- JACOBSEN, O.H.; LEIJ, F.J.; van GENUCHTEN, M.TH. Lysimeter study of anion transport during steady flow through layered coarse-textured soil profiles. **Soil Science**, Baltimore, v.154, n.3, p.196-205, Sept. 1992

- JARDINE, P.M.; WILSON, G.V.; LUXMOORE, R.J. Modeling the transport of inorganic ions through undisturbed soil columns from two contrasting watersheds. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.52, p.1552-1559. 1988.
- JENSEN, M.E.; BURMAN, R.D.; ALLEN R.G. **Evapotranspiration and irrigation water requirements**. New York: America Society of Civil Engineers, 1990. 332p.
- JOHNSON, A.D., CABRERA, M.L.; McCracken, D.V.; RADCLIFFE, D.E. LEACHN simulations of nitrogen dynamics and water drainage in na ultisol. **Agronomy Journal**, v.91, n.4, p.597-606, July-Aug. 1999.
- JURY, W.A.; GARDNER, W.R.; GARDNER, H.G. **Soil physics**, 15 ed., New York: Jonh Wiley and Sons Inc., 1991. 328p.
- JURY, W.A.; GARDNER, W.R.; SAFFIGNA, P.G.; TANNER, C.B. Model for predicting simultaneous movement of nitrate and water through a loamy sand. **Soil Science**, Baltimore , v.122, n.1, p.36-43, Jan. 1976.
- KOSKINEN, W.C.; HARPER, S.S. The retention process: mechanisms. In CHENG, H.H.; BAILEY, G.W.; GREEN, R.E. and SPENCER, W.F. (ed.). **Pesticides in the soil environment: processes, impacts, and modeling**, Madison: Soil Science Society of America Inc., 1990.p.51-78.
- LEIJ, F.J.; DANE, J.H.; van GENUCHTEN, M.Th. Mathematical analysis of one-dimensional solute transport in a layered soil profile. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.55, n.4, p.944-953, 1991.
- LEMLEY, A.T.; WAGENET, R.J.; ZHONG, W.Z. Sorption and degradation of aldicarb and its oxidation products in a soil-water flow system as a function of pH and temperature. **Journal of Environmental Quality**, Madison, v.17, n.3, p.508-414, July/sept. 1988.
- LIBARDI, P.L. **Dinâmica da água no solo**, 1 ed., Piracicaba, SP: O autor, 1995. 497p.
- LIWANG, M.; SCOTT, H.D.; SHAFFER, M.J.; AHUJA, L.R. RZWQM simulations of water and nitrate moviment in a manured tall fescue field. **Soil Science**, v.163, n.4, p.259-270, Apr. 1998.
- MANTOVANI, E.C. Desarrollo y evaluacion de modelos para el manejo del riego: estimacion de la evapotranspiracion y efectos de la uniformidade de aplicaciondel riego sobre la producción de los cultivos. Córdoba: Universidad de Córdoba. 1993. 184p. (Tesis -Ingenieria Agronômica).
- MARTINEZ, M.A. **Modeling subsurface drainage in clermont silt loam using finite element technique**. West Lafeyete: Purdue University. 1989. 173p. (Thesis – Doctor of Philosophy in the Agricultural Engineering).

- MILLER, J.R.; LOW, P.F. Threshold gradient for water flow in clay systems. **Soil Science Society of America Journal**, v.27, n.6, p.605-609, 1963.
- MONTENEGRO, S.M.G.L. **Stochastic analysis of salt accumulation in heterogeneous irrigated soils: a case study in northeast Brazil**. Newcastle: University of Newcastle. 1997. 274p. (Thesis – Doctor of Philosophy in the Civil Engineering).
- MUALEM, Y. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. **Water Resources Research**, Washington, v.12, n.3, p.513-522. 1976.
- NASCIMENTO FILHO, V.F.; REICHARDT, K.; LIBARDI, P.L. Deslocamento miscível do íon cloreto em terra rocha estruturada (Alfisol) saturada em condições de campo. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Campinas-SP, v.3, n.2, p.67-73, mai./ago. 1979
- NEUMAN, S.P.; FEDDES, R.A.; BRESLER, E. Finite element analysis of two-dimensional flow in soils considering water uptake by roots: I. Theory. **Soil Science Society of America Proceeding**, v.39, p.224-230. 1975
- NOUR el-DIN, M.M.; KING, I.P.TANJI, K.K. Salinity management model: I. development. **Journal of Irrigation and Drainage Engineering**, v.113, n.4, p.440-453, Nov. 1987.
- OLIVEIRA, L.F.C. de; MARTINEZ, M.A.; PRUSKI, F.F.; RUIZ, H.A.; LIMA, L.A. Transporte de solutos no solo e no escoamento superficial: I – desenvolvimento do modelo e simulação do movimento de água e escoamento superficial. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v.4, n.1, p.63-69, Jan./Abr., 2000.
- PARKER, J.C.; van GENUCHTEN M.Th. **Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments**. Virginia-EUA: Virginia Agricultural Experiment Station, Bulletin 84-3, 1984. 96p.
- PARLANGE, J.Y.; STARR, J.L.; van GENUCHTEN, M.Th.; BARRY, D.A.; PARKER, J.C. Exit Condition for miscible displacement experiments. **Soil Science**, Baltimore, v.153, n.3, p.165-171, Mar. 1992.
- PIZARRO, F. **Drenaje agrícola y recuperacion de suelos salinos**, 2 ed., Madrid: Editorial Agrícola Española, 1985. 542p.
- PORRO, I.; WIERENGA, P.J.; HILLS, R.G. Solute transport through large uniform and layered soil columns. **Water Resources Research**, Washington, v.29, n.4, p.1321-1330, April, 1993
- PREVEDELLO, C.L. **Física do solo com problemas resolvidos**. Curitiba: O Autor. 1996. 446p.

- RAGAB, R.; COOPER, J.D. Variability of unsaturated zone water transport parameters: implications for hydrological modelling: 2 – predicted vs. in situ measurements and evaluation of methods. **Journal of Hydrology**, v.148, p.133-147. 1993.
- REICHARDT, K. **Dinâmica da matéria e da energia em ecossistemas**, 2 ed., Piracicaba, SP: ESALQ/USP, 1996. 513p.
- RIGHETTO, A.M. **Hidrologia e recursos hídricos**, 1. Ed., São Carlos: EESC/USP, 1998. 819p.
- RIGITANO, R.L. de O.; GOUVEIA, A.V. Contaminação de mananciais hídricos com inseticidas em Maria da Fé-MG. In Congresso Brasileiro de Entomologia, 15, Caxambu, 1995, **Resumos...** Lavras:UFLA, 1995. p.809.
- ROGERS, J.S. Capacitance and initial time step effects on numerical solutions of Richards equation. **Transaction of ASAE**, St. Joseph, v.37, n.3, p.807-813, May/Jun. 1994.
- RUSSO, D.; BRESLER, E.; SHANI, U.; PARKER, J.C. Analyses of infiltration events in relation to determining soil hydraulic properties by inverse problem methodology. **Water Resources Research**, Washington, v.27, n.6, p.1361-1373. 1991
- SASSNER, M.; JENSEN, K.H.; DESTOUNI, G. Chloride migration in heterogeneous soil. 1: experimental methodology and results. **Water Resources Research**, Washington, v.30, n.3, p.735-745, Mar. 1994.
- SAXTON, K.E.; SCHUMAN, G.E.; BURWELL, R.E. Modeling nitrate movement and dissipation in fertilized soils. **Soil Science Society of American Journal**, v.41, p.265-271, 1977.
- SELIM, H.M.; ISKANDAR, I.K. Modeling nitrogen transport and transformations in soil: 1. Theoretical considerations. **Soil Science**, Baltimore, v.131, n.4, p.233-241, Apr. 1981.
- SEREM, V.K.; MADRAMOOTOO, C.A.; DODDS, G.T.; DUTILLEUL, P.; MEHUYS, G. Nitrate-N and water movement in soil columns as influenced by tillage and corn residues. **Transaction of the ASAE**, St Joseph, v.40, n.4, p.1001-1012, July/Aug. 1997.
- SOMMA, F.; HOPMANS, J.W.; CLAUSNITZER, V. Transient three-dimensional modeling of soil water and solute transport with simultaneous root growth, root water and nutrient uptake. **Plant and Soil**, Netherlands, v.202, p.281-293, 1998.
- SPALDING, R.F.; EXNER, M.E. Occurrence of nitrate in groundwater – A Review. **Journal Environmental Quality**, Madison, v.22, n.3, p.392-402, May./Jun. 1993.

- STEHOUWER, R.C.; DICK, W.A.; TRAINA, S.J. Sorption and retention of herbicides in vertically oriented earthworm and artificial burrows. **Journal of Environmental Quality**, Madison, v.23, n.2, p.286-292, Mar./Apr. 1994.
- SUBBAIAH, R.; RAO, K.A. Root growth simulation model under specified environment. **Journal of Irrigation and Drainage Engineering**, New York, v.119, n.5, p.898-904, Sep./Oct. 1993.
- SULEKHA, B.; KASHYAP, D.; DUIJNISVELD, W.H.M. Two-phase-reactive solute-transport simulation in unsaturated zone. **Journal of Irrigation and Drainage Engineering**, v.124, n.3, p.140-147, May/Jun., 1998.
- TILLOTSON, W.R.; WAGENET, R.J. Simulation of fertilizer nitrogen under cropped situations. **Soil Science**, Baltimore, v.133, n.3, p.133-143, Mar. 1982.
- TORIDE, N.; LEIJ, F.J. and van GENUCHTEN, M.Th. Flux-averaged concentrations for transport in soils having nonuniform initial solute distributions. **Soil Science Society of American Journal**, v.57, p.1406-1409, 1993.
- TORIDE, N.; LEIJ, F.J.; van GENUCHTEN, M.Th. **The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments**. Riverdide: U.S. Salinity Laboratory, 1995. 115p. (Research Report, 137).
- TRUMAN C.C.; LEONARD, R.A. Effects of pesticide, soil and rainfall characteristics on potencial pesticide loss by percolation - a GLEAMS simulation. **Transaction of the ASAE**, St Joseph, v.34, n.6, p.2461-2468, Nov./Dec. 1991.
- TSUBOYAMA, Y.; SIDLE, R.C.; NOGUCHI, S.; HOSODA, I. Flow and solute transport through the soil matrix and macropores of a hillslope segment. **Water Resources Research**, Washington, v.30, n.4, p.879-890, Apr. 1994.
- TUCCI, C.E.M. Interceptação. In: TUCCI, C.E.M. **Hidrologia: ciência e aplicação**, Porto Alegre: Editora da Universidade/UFRGS, 1993. p.243-252.
- VANCLOOSTER, M.; VIAENE, P.; DIELS, J.; CHRISTIAENS, K. **Wave**, a mathematical model for simulating water and agrochemicals in the soil and vadose environment. Leuven: Institute for Land and Water Management, 1994. 145p.
- van GENUCHTEN, M.Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society America Journal**, Madison, v.44, p.892-898, 1980.
- van GENUCHTEN, M.Th.; PARKER, J.C. Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns. **Soil Science Society of American Journal**, Madison, v.48, p.703-708, 1984.

- van GENUCHTEN, M.Th.; WIERENGA, P.J. Solute dispersion coefficients and retardation factors. In KLUTE, A. (ed.). **Methods of soil analysis**: part 1 – physical and mineralogical methods, Madison: Soil Science Society of America, 1986. p.1025-1054.
- VEREecken, H., VANCLOOSTER, M., SWERTS, M., DIELS, J. Simulating water and nitrogen behavior in soil cropped with winter wheat. **Fertilizer Research**, Hague, v.27, n.1, p.233-243, Jan./Mar. 1991.
- VERMA, A.; KANWAR, R.S.; TIM, U.S. Modification of Drainage model by using the nitrogen component from the Gleams model. **Transactions of the ASAE**, St. Joseph, v.38, n.3, p.717-724, May./June. 1995.
- VOGEL, T.; HUANG, K.; ZHANG, R.; van GENUCHTEN, M.Th. **The HYDRUS code for simulating one-dimensional water flow, solute transport, and heat movement in variably-saturated media**. Riverside: U.S. Salinity Laboratory, 1996. 131p. (Research Report, 140).
- WANG, F.; BEAR, J.; SHAVIV, A. A n-dynamics model for predicting n-behavior subject to environmentally friendly fertilization practices: II – numerical model and model validation. **Transport in Porous Media**, Netherlands, v.33, p.309-324, 1998.