

**FELIZARDO ADENILSON ROCHA**

**MODELAGEM NÚMERICA DO TRANSPORTE DE AMÔNIO E NITRATO  
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  
2005

**Ficha catalográfica preparada pela Seção de Catalogação e  
Classificação da Biblioteca Central da UFV**

T

R672m  
2005

Rocha, Felizardo Adenilson, 1973-  
Modelagem numérica do transporte de amônio e nitrato  
no solo. / Felizardo Adenilson Rocha – Viçosa: UFV,  
2005.  
xii, 110f. : il. ; 29cm.

Orientador: Mauro Aparecido Martinez.  
Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 102-110.

1. Solos - Movimento de fertilizantes - Modelos  
matemáticos. 2. Solos - Percolação. 3. Solos - Teor de  
nitrogênio. I. Universidade Federal de Viçosa. II. Título.

CDD 22.ed. 631.4

**FELIZARDO ADENILSON ROCHA**

**MODELAGEM NÚMERICA DO TRANSPORTE DE AMÔNIO E NITRATO  
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: 25 de Maio de 2005.

---

Prof. Paulo César Oliveira

---

Prof. Rogério Faria Vieira

---

Prof. Antônio Teixeira de Matos  
(Conselheiro)

---

Prof. Reinaldo Bertola Cantarutti  
(Conselheiro)

---

Prof. Mauro Aparecido Martinez  
(Orientador)

À minha mãe Maria, pelo esforço dedico a minha formação, à memória de meu pai Felizaldo, a minha noiva Joseane, os meus irmãos Fernando, Renato, Doralice e Joice,

**DEDICO e OFEREÇO.**

## **AGRADECIMENTOS**

A Deus, pela eterna presença em minha vida.

Ao Departamento de Engenharia Agrícola da UFV, pela oportunidade de realização deste curso.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo suporte financeiro por meio da concessão da bolsa de estudos.

Ao Professor Mauro Aparecido Martinez pela orientação, seus ensinamentos e sugestões, paciência, amizade e apoio em todas as etapas.

Aos Conselheiros Antônio Teixeira de Matos, Reinaldo Bertola Cantarutti, pelas indispensáveis críticas e sugestões.

Aos meus familiares pelo carinho, apoio, tornando possível vencer mais uma etapa em minha vida.

À minha noiva Joseane, pelo amor, apoio e incentivo demonstrados que, mesmo longe sempre se mostrou presente nos momentos difíceis.

Ao Heber pela amizade e ajuda indispensável na elaboração do programa em linguagem Delphi 7,0, sem a qual este trabalho não teria êxito.

Aos colegas de curso Édio, André, Flávia, Giovanni, Cristiano, Flávio Gonçalves pelo convívio.

Aos professores Magrão e Sérgio Zolnier e ao estagiário Adalberto pela ajuda na montagem do sistema de aquisição de dados de temperatura do solo.

À professora Sandra que gentilmente cedeu as câmaras de incubação e o laboratório para montagem do experimento de incubação das amostras de solo.

Aos estagiários Vilmar, André, Evandro, Guilherme e Paulo pela grande ajuda prestada durante a montagem e condução do experimento em laboratório.

Aos funcionários do departamento de engenharia agrícola Simão, Chicão, Silas, Marcos, Zé Mauro, Lucimar e aos funcionários do departamento de solos

Carlos Fonseca, Jorge, Zélia e especialmente ao Hernando (Bodão) pela inestimável ajuda na realização das análises químicas.

Aos colegas de república pela convivência durante o período de realização do curso, especialmente ao Itamar, Saulo (Hulk), Marco Aurélio, Helder, Romário, Perin, Filipe e Leandro.

A todos que não foram nominalmente citados, mas que contribuíram para que meu objetivo fosse alcançado.

## ÍNDICE

	Página
LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS.....	Vii
RESUMO .....	X
ABSTRACT .....	Xii
1. INTRODUÇÃO .....	01
2. REVISÃO DE LITERATURA .....	04
2.1. Movimento de água no solo .....	04
2.2. A lei de Darcy.....	04
2.2.1. Pressuposições da lei de Darcy.....	05
2.3. A equação da continuidade.....	07
2.4. Equação de Richards.....	07
2.5. Estimativa da Curva de retenção de água no solo e da condutividade hidráulica.....	08
2.6. Transporte de solutos	10
2.6.1. Transporte convectivo de solutos no solo.....	10
2.6.2. Transporte difusivo de solutos no solo.....	11
2.6.3. Transporte dispersivo de solutos no solo.....	11
2.7. Transferência de calor no solo.....	16
2.7.1. Propriedades térmicas do solo.....	18
2.8. Ciclo do Nitrogênio no solo.....	21
2.8.1. Mineralização.....	21
2.8.2. Nitrificação.....	23
2.8.3. Desnitrificação.....	25
2.8.4. Aspectos microbiológicos.....	27
2.9. Transporte de nitrogênio considerando as transformações biológicas.....	28
3. MATERIAL E MÉTODOS .....	32

3.1. Descrição do modelo físico.....	32
3.2. Transporte de calor no solo.....	36
3.2.1. Parâmetros de entrada do modelo de temperatura do solo.....	39
3.3. Descrição do experimento.....	42
3.3.1. Experimento na câmara de incubação.....	42
3.3.2. Transporte de nitrato e amônio em colunas de solo.....	46
3.3.2.1- Modelo físico de laboratório.....	47
3.4. Sistema para aquisição dos dados de temperatura do solo.....	50
3.5. Obtenção do Fator de retardamento.....	51
3.6. Critério de avaliação dos modelos.....	52
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	54
4.1- Apresentação das modificações inseridas no modelo SIMASS_C.....	54
4.2- Mineralização da matéria orgânica e nitrificação do amônio.....	57
4.3. Avaliação do modelo de temperatura do solo.....	72
4.4- Características físico-hídricas dos solos estudados.....	76
4.5. Simulação da distribuição de água no solo .....	79
4.6. Movimentação de nitrogênio no solo.....	84
4.6.1. Simulação da distribuição de nitrato e amônio para o solo arenoso.....	84
4.6.2. Simulação da distribuição de nitrato e amônio para o solo argiloso.....	91
4.7. Pressuposições do modelo desenvolvido.....	96
5. RESUMO E CONCLUSÕES .....	99
6. RECOMENDAÇÕES.....	100
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	101

## LISTA DE ABREVIATURAS E SÍMBOLOS

<b>Símbolo</b>	<b>Definição</b>	<b>Unidade</b>
$A_0$	amplitude média diária da temp. na superfície do solo	$^{\circ}\text{C}$
$\phi$	potencial total da água no solo	cm
$\rho_g$	massa específica da água do solo	$\text{g cm}^{-3}$
$\eta$	viscosidade dinâmica da água do solo	$\text{g cm}^{-1} \text{h}^{-1}$
$\gamma$	parâmetro do modelo Brooks e Corey	adimensional
$\theta$	teor de água no solo (base volume)	$\text{cm}^{-3} \text{cm}^{-3}$
$\tau$	fator de tortuosidade	adimensional
$\lambda$	dispersividade do solo	cm
$v$	velocidade da solução no poro	$\text{cm h}^{-1}$
$\Gamma$	termo fonte ou sumidouro de solutos	$\text{g cm}^{-2} \text{h}^{-1}$
$\alpha$	parâmetros do modelo van Genuchten	adimensional
$n, m$	parâmetros do modelo van Genuchten	adimensional
$\rho_g$	massa específica do solo	$\text{g cm}^{-3}$
$\theta_r$	umidade residual	$\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$
$\theta_s$	umidade de saturação	$\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$
$\mu$	porosidade do solo	$\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$
$C$	concentração do soluto na fase líquida do solo	$\text{g cm}^{-3}$
$C_0$	concentração do soluto aplicada	$\text{g cm}^{-3}$
$C_i$	concentração inicial do solo	$\text{g cm}^{-3}$
$c$	concentração relativa	adimensional
$C_h$	calor específico do solo	$\text{cal cm}^{-3} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$
$C_{\text{NO}_3}$	concentração de nitrato	$\text{mg kg}^{-1}$

$C_2$	concentração potencial do nitrato	$\text{mg kg}^{-1}$
$C_{\text{NH}_4}$	concentração de amônio	$\text{mg kg}^{-1}$
$C_1$	concentração potencial de amônio	$\text{mg kg}^{-1}$
CFN	Com fonte de nitrogênio	
CSN	Com sumidouro de nitrogênio	
$d$	fator de atenuação da temp. com a prof. do solo	cm
$D$	coeficiente de dispersão hidrodinâmica	$\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$
$D_o$	coeficiente de difusão molecular em água pura	$\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$
$D_c$	difusividade térmica do solo	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$
$D_h$	coeficiente de dispersão	$\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$
$D_m$	coeficiente de difusão molecular no solo	$\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$
$E(h)$	capacidade hídrica específica	$\text{cm}^{-1}$
$f_{\text{arg}}$	conteúdo volumétrico de argila do solo	$\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$
$F_s$	relação entre o gradiente médio de temperatura entre as partículas sólidas e a água	adimensional
$F_a$	Relação entre o gradiente de temperatura do ar e a água	adimensional
$h$	potencial matricial do solo	cm
$h_b$	potencial de entrada de ar	cm
$J_s$	fluxo de soluto no solo	$\text{g cm}^{-2} \text{h}^{-1}$
$J_D$	fluxo difusivo	$\text{g cm}^{-2} \text{h}^{-1}$
$J_h$	fluxo dispersivo	$\text{g cm}^{-2} \text{h}^{-1}$
$J_m$	fluxo de massa do soluto	$\text{g cm}^{-2} \text{h}^{-1}$
$K_o$	condutividade hidráulica saturada do solo	$\text{cm h}^{-1}$
$K(h)$	condutividade hidráulica não saturada do solo	$\text{cm h}^{-1}$
$K_d$	coeficiente de partição ou distribuição	$\text{cm}^3 \text{g}^{-1}$
$\kappa$	condutividade térmica do solo	$\text{cal cm}^{-1} \text{h}^{-1} \text{°C}^{-1}$
$k_s$	condutividade térmica dos sólidos do solo	$\text{kJ m}^{-1} \text{d}^{-1} \text{K}^{-1}$
$k_w$	condutividade térmica da água	$\text{kJ m}^{-1} \text{d}^{-1} \text{K}^{-1}$
$k_a$	condutividade térmica do ar	$\text{kJ m}^{-1} \text{d}^{-1} \text{K}^{-1}$
$k_1$	taxa de perda de amônio	$\text{g cm}^{-3}$

$k_2$	taxa de formação de nitrato	$\text{g cm}^{-3}$
$n_1$	parâmetro da equação de Freundlich	adimensional
$n^*$	constante que representa o expoente da velocidade da solução nos poros	adimensional
$n_o$	número de observações	adimensional
$N$	Nitrogênio	
$q$	fluxo de água no solo	$\text{cm h}^{-1}$
$q_c$	fluxo de calor no solo por condução	$\text{W cm}^{-2}$
$R_a$	termo fonte ou sumidouro de água	$\text{h}^{-1}$
$R$	fator de retardamento	adimensional
$S$	concentração do soluto na fase sólida do solo	$\text{g g}^{-1}$
$S_e$	saturação efetiva	adimensional
$SSN$	Sem sumidouro de nitrogênio	adimensional
$t$	coordenada temporal	horas
$T$	temperatura do solo	$^{\circ}\text{C}$
$T_a$	temperatura média da superfície do solo	$^{\circ}\text{C}$
$T_{\max}$	temperatura máxima da superfície do solo	$^{\circ}\text{C}$
$T_{\min}$	temperatura mínima da superfície do solo	$^{\circ}\text{C}$
$u$	teor de água no solo (base peso)	$\text{Kg kg}^{-1}$
$\omega$	freqüência angular	$\text{rad h}^{-1}$
$z$	coordenada de posição vertical (profundidade)	cm

## RESUMO

ROCHA, Felizardo Adenilson, D. S., Universidade Federal de Viçosa, maio de 2005. **Modelagem do transporte de nitrogênio no solo considerando os processos de mineralização da matéria orgânica e da nitrificação do amônio**. Orientador: Mauro Aparecido Martinez. Conselheiros: Antônio Teixeira de Matos e Reinaldo Bertola Cantarutti.

Grande atenção tem sido dada aos impactos no ambiente e à saúde humana causados pelo uso inadequado de fertilizantes químicos na agricultura. Esses produtos, após sua aplicação, alcançam o solo onde processos de natureza física, química e ou biológica determinarão o destino destes produtos no ambiente. Adubações nitrogenadas, bastante comum e necessária às plantas, podem disponibilizar o  $\text{N-NO}_3^-$  que, devido a sua alta mobilidade no solo, podem atingir águas superficiais e subterrâneas, favorecendo eutrofização das mesmas. A compreensão dos processos de transformações biológicas do nitrogênio (mineralização e nitrificação), de forma conjunta, é fundamental para o entendimento da dinâmica do nitrogênio no solo, não só do ponto de vista da fisiologia da planta e fertilidade do solo bem como do ponto de vista ambiental. O objetivo deste trabalho foi desenvolver um modelo de mineralização da matéria orgânica e de nitrificação do amônio e incorporá-lo ao modelo transporte de soluto no solo (SIMASS\_C), bem como simular as concentrações e a distribuição de nitrato e amônio no perfil do solo considerando o efeito da temperatura e umidade do solo. A pesquisa foi conduzida em duas etapas. A primeira etapa constou da formulação matemática e elaboração da rotina computacional do modelo, em linguagem Delphi 7.0. Na segunda etapa, foi conduzido um experimento em câmaras de incubação, para dois solos, na qual amostras destes solos foram

incubadas ao longo do tempo para, posteriormente, parametrizar os modelos de mineralização e nitrificação. Outro experimento, em colunas de solo, também foi realizado para testar o modelo de transporte de água e solutos no solo. O modelo exponencial apresentou bom ajuste aos dados de mineralização e nitrificação. Utilizando-se o modelo foi possível prever a tendência do movimento vertical do nitrato e amônio bem como a distribuição do perfil de umidade em colunas de solo não saturado. A inclusão do processo de mineralização e nitrificação no modelo SIMASS\_C resultou numa melhoria na estimativa da concentração de nitrato e amônio no solo. O modelo de temperatura permitiu estimar a temperatura no perfil do solo e ao longo do tempo com boa precisão.

## ABSTRACT

ROCHA, Felizardo Adenilson, D. S., Federal University of Viçosa, May of 2005.  
**Modelling of the soil nitrogen transport regarding the organic matter mineralization and ammonium nitrification processes.** Adviser: Mauro Aparecido Martinez. Committee Members: Antônio Teixeira de Matos and Reinaldo Bertola Cantarutti.

It has been given a big regard to the impacts in the environment and human health caused by the inappropriate application of chemical fertilizers in the agriculture. After its application, those products reach the soil, where physical, chemistry and or biological processes will determine its fate on the ambient. The fertilizer with nitrogen are very usual and necessary to the plants because it can provide  $N-NO_3^-$ , however, due its high mobility in the soil, it can reaches superficial and underground waters, stimulating water eutrofication. The comprehension of the biological processes transformations of the nitrogen (mineralization and nitrification), in an whole way, is fundamental for the understanding of the dynamics of the nitrogen in the soil, not only of the point of view of the plant physiology and soil fertility as well as of the environmental point of view. The objective of this work was to develop a model of organic matter mineralization and the ammonium nitrification and include then into the solute transport model in the soil (SIMASS\_C), as well as to simulate the concentrations and distribution of nitrate and ammonium in the soil profile considering the temperature and humidity effect of the soil. The research was happened in two periods. The first stage consisted of the mathematical formulation and elaboration of the computational routine model, in Delphi 7.0 language. The second stage, an experiment was led

in incubation cameras, for two soils, which samples of these soils were incubated along the time, and later, it were fitted the parameters of the mineralization and nitrification models. In soil columns, another experiment was accomplished to test the model the water and soil solutes transport. The exponential model gave good fitting to the mineralization and nitrification data. It was possible to estimate the vertical movement of the nitrate and ammonium as well as the profile distribution moisture, in not saturated soil columns, with good results. The incorporation of the mineralization and nitrification processes in the model SIMASS\_C resulted in an improvement in the estimate of the nitrate and ammonium concentration in the soil. The temperature model allowed to estimate temperature soil profile with good precision.

## 1. INTRODUÇÃO

Grande atenção tem sido dispensada aos impactos no ambiente e à saúde humana causados pelo uso de produtos químicos na agricultura. Países que usaram intensivamente, recomendados em pacotes tecnológicos visando o aumento da produtividade ou controle de vetores de doenças, destinam grandes financiamentos a pesquisas com o objetivo de minimizar seus impactos. Dentre os fatores que potencialmente podem causar danos ao ambiente, ressalta-se os fertilizantes químicos, em especial aqueles ricos em fósforo e nitrogênio.

Os nutrientes aplicados no solo estarão sujeitos a processos de natureza física, química e biológica, os quais determinarão se eles permanecerão adsorvidos na camada agricultável do solo, absorvidos pelas plantas ou se moverão no solo até atingir camadas mais profundas. O movimento e o destino desses produtos no solo são influenciados por processos de retenção (adsorção e absorção), de transporte (lixiviação, volatilização, escoamento superficial), de transformação e por interações desses processos (SPADOTTO, 2003).

O nitrogênio é muito usado na agricultura por ser um dos principais nutrientes para o crescimento e produtividade das plantas, sendo, por essa razão, de grande importância o entendimento dos processos que afetam a sua permanência no solo. A dinâmica desse elemento no solo envolve a transformação das formas não disponíveis para as plantas em formas disponíveis e vice-versa, o que dificulta o entendimento de seu comportamento no solo.

As formas inorgânicas de nitrogênio (N) comumente encontradas no solo são  $\text{N-NO}_3^-$  e  $\text{N-NH}_4^+$ , produzidas principalmente pela mineralização da matéria

orgânica ou pela adição de fertilizantes; sob condições de bom arejamento, o  $\text{N-NO}_3^-$  é a forma dominante (FERNANDES e ROSSIELO, 1995). O nitrato tem como característica a alta mobilidade no solo, podendo, por isso, atingir o lençol freático, contaminando-o, e contribuindo para a eutrofização de águas superficiais. Como implicações ambientais, pode-se mencionar aumento na taxa de mortalidade de peixes em rios e lagos eutrofizados e a potencialidade de causar danos à saúde humana (câncer de estômago e metahemoglobinemia ou síndrome do bebê azul), se ingerido em quantidades superiores a  $9 \text{ g dia}^{-1}$ . Em países de clima temperado, onde o problema de contaminação de águas é mais sério, devido às características do solo e ao elevado aporte de N, medidas legislativas passaram a ser adotadas. A World Health Organization estabelece que o limite máximo de  $\text{N-NO}_3^-$  em águas potáveis deva ser de  $22,6 \text{ mg L}^{-1}$  (ADDISCOTT, 1996).

As transformações biológicas provocadas pela fauna do solo (JÉGOU et al., 1999), pela biomassa do solo (TIUNOV e SCHEU, 1999), presença ou ausência de plantas, fluxo preferencial e as práticas de manejo do solo estão envolvidos na determinação do destino do nitrogênio no ambiente. Há, contudo, necessidade de se aprofundar o conhecimento sobre a mobilidade de sua forma aniônica ( $\text{NO}_3^-$ ) em solos tropicais, tendo em vista a ocorrência da prevalência de cargas positivas nesses solos, abaixo da camada superficial, o que limitar-lhe o deslocamento no solo.

Os avanços computacionais aliados aos métodos numéricos têm permitido o desenvolvimento de modelos que descrevem o transporte de solutos no solo. A vantagem principal do uso de modelos é a economia de tempo e capital investido. Eles possibilitam simular múltiplos cenários, em vez de se utilizar longos períodos de observação e de coleta de dados (AZEVEDO et al., 1996).

Recentemente pesquisadores brasileiros começaram a atuar nesse campo de pesquisa. Os trabalhos desenvolvidos por OLIVEIRA et al. (2000a) e COSTA (1998) buscaram desenvolver modelos capazes de prever o transporte de água e solutos no solo. Este último autor desenvolveu um modelo computacional para simular o transporte de água e solutos no solo sob condições de escoamento não-permanente, na vertical. Dando continuidade aos trabalhos de COSTA et al. (1998), CORRÊA (2001) desenvolveu o modelo

o SIMASS-C (Simulação do Movimento de Água e Solutos no Solo com a presença de Cultura) que considera a extração de água e solutos pela cultura. No entanto, até o momento, nesse modelo não se considera os processos de transformação biológica do N, como a mineralização e da nitrificação do amônio no solo. Por outro lado, as transformações a que o N está sujeito e suas interações no solo podem ocorrer simultaneamente ao movimento de água, como acontece freqüentemente em áreas fertirrigadas.

Portanto, fica evidente a importância da compreensão dos processos de mineralização e nitrificação do nitrogênio, de forma conjunta, para o entendimento da dinâmica do nitrogênio no solo, não só do ponto de vista da fisiologia da planta e da fertilidade do solo mas também do ponto de vista ambiental, uma vez que esses processos disponibilizam nutrientes que podem se mover no solo. Além disto, ele possibilita definir estratégias de manejo adequadas para aumentar a eficiência de absorção de N pelas plantas e minimizar as perdas por lixiviação.

Embora tenham sido realizados vários estudos relacionados a esses processos, há a necessidade de se aprofundar o conhecimento sobre a mineralização e nitrificação, no que se refere à lixiviação de  $N-NH_4^+$  e  $N-NO_3^-$  em solos tropicais, que se caracterizam pela elevada acidez e minerais que apresentarem carga variável. Alguns estudos reportam que a lixiviação de nitrato é variável com a densidade de cargas positivas no solo, pH, teor de matéria orgânica, microrganismos predominantes no solo e com a fonte e quantidade do adubo aplicada.

Diante do exposto, o objetivo deste trabalho foi:

- Desenvolver e testar um modelo de transporte de nitrogênio no solo que considere as transformações das formas orgânicas e inorgânicas do nitrogênio no solo;
- Selecionar e parametrizar modelos que simulem a mineralização e a nitrificação do nitrogênio, considerando os efeitos da temperatura e teor de água no solo;

## **2. REVISÃO DE LITERATURA**

### **2.1. Movimento de água no solo**

A água move-se no sistema solo-planta-atmosfera na forma líquida e de vapor. O movimento da água no solo ocorrerá quando houver diferenças de potencial total entre diferentes pontos de um sistema.

A quantidade de água e a energia que a retém na matriz do solo são características importantes no estudo da fase líquida do solo. Vários processos são influenciados pela quantidade de água contida no solo. Entre eles, pode-se citar as trocas de gasosas entre o solo e a atmosfera, a difusão de nutrientes para as raízes das plantas, a temperatura do solo, a velocidade de deslocamento de solutos na zona radicular. Por sua vez, a energia com que a água é retida no solo também afeta vários processos que ocorrem no solo, incluindo a eficiência de extração de água e nutrientes pelas plantas, a quantidade de água drenada sob o efeito da gravidade e o movimento ascendente de água e soluto no solo.

### **2.2. A Lei de Darcy**

O movimento de água em meios porosos é regido pelas leis gerais da mecânica dos fluidos: conservação da massa e energia (NEVES et al., 2000).

O engenheiro Francês Henry Darcy realizou um experimento para estudar as características do escoamento de água através de um filtro de areia. Este experimento, realizado em 1856, se tornou clássico na área de hidráulica e geotecnia e deu origem à equação geral de fluxo em meio saturado. O autor verificou que o fluxo de água é proporcional ao gradiente de potencial

hidráulico dentro do solo. Com a equação apresentada abaixo pode-se descrever o movimento de um fluido em meio poroso homogêneo e saturado (REICHARDT, 1985; PREVEDELLO, 1996).

$$q = -K_0 i = -K_0 \frac{\partial \phi t}{\partial z} \quad (2.1)$$

em que:

- q = fluxo de água no solo, em  $\text{cm h}^{-1}$ ;
- $\phi t$  = potencial total da água no solo, em cm;
- $K_0$  = condutividade hidráulica do solo saturado, em  $\text{cm h}^{-1}$ ;
- i = gradiente de potencial, adimensional;
- z = coordenada de posição vertical, em cm.

Dimensionalmente, o gradiente de potencial da água (i) é uma força, pois ele representa uma energia por unidade de comprimento. Esta força é responsável pelo movimento de água no solo (REICHARDT, 1985). Quando o gradiente é nulo, não há força e, conseqüentemente, não há movimento de água. Esse movimento se dá no sentido do decréscimo do potencial, isto é, a água sempre se move de pontos de maior potencial para pontos de menor potencial.

### 2.2.1. Pressuposições da Lei de Darcy

A equação 2.1 é válida para fluidos incompressíveis, sob condições isotérmicas, e escoamento da água no solo em solos saturados, sob regime laminar, isto é, as partículas do fluido se movimentam em trajetórias paralelas e retilíneas, em que uma não interferirá no movimento da outra. No caso de regime laminar, a resistência ao escoamento é devida principalmente à viscosidade da água. Qualquer desvio deste tipo de relação origina os escoamentos *não-Darcinianos*, que podem ocorrer em escoamentos de alta velocidade.

Pesquisas efetuadas posteriormente à postulação da Lei de Darcy demonstraram que sua utilização é recomendada para valores de Re

(Reynolds) abaixo de 1 e, em casos excepcionais, até 10 (BEDIENT et al., 1994; MACHADO, 1997). A grande diferença entre o número de Reynolds crítico para escoamentos em condutos forçados e no solo está no fato de que, no solo, os canalículos ligando os diversos poros em seu interior são irregulares, tortuosos e, eventualmente, não contínuos (NEVES et al., 2000).

Para os tamanhos de poros geralmente encontrados nos solos, o escoamento através deles é, na maioria dos casos, de natureza laminar. No caso de solos com a presença de partículas de diâmetro maior que 2 mm (como cascalho e pedregulhos) pode ocorrer escoamento turbulento, ainda assim, para que ele ocorra é necessário que haja altos valores de gradientes hidráulicos (REICHARDT, 1985).

Na prática, o movimento de água no solo ocorre em condição de solo não saturado. Nessa condição, os poros ocupados por ar reduzem a área efetiva ao escoamento, aumentando a tortuosidade do meio. Isso resulta numa condutividade hidráulica em meios porosos não saturados sempre menor do que a que ocorre nos saturados, para um mesmo solo (HILLEL, 1980; REICHARDT, 1985).

O primeiro trabalho, encontrado na literatura, que apresenta uma equação que quantifica o movimento da água em condição de não-saturação é o de Edgar Buckingham (BUCKINGHAM, 1907). As modificações feitas por BUCKINGHAM (1907) na lei de Darcy são fundamentadas na suposição de que a condutividade hidráulica do solo não-saturado apresenta relação funcional com a umidade ou com o potencial matricial e que o potencial total de água no solo,  $\phi t$ , em condições isotérmicas e meio não-saturado, e resulta da soma dos potenciais matricial ( $h$ ) e gravitacional ( $z$ ), ou seja,  $\phi t = (h + z)$ . Dessa forma, na direção vertical, tem-se que:

$$q = -K(\theta) \left( \frac{\partial \phi t}{\partial z} \right) = -K(\theta) \frac{\partial}{\partial z} (h + z) = -K(\theta) \left( \frac{\partial h}{\partial z} \right) - K(\theta) = -K(\theta) \left( \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \quad (2.2)$$

ou

$$q = -K(h) \frac{\partial h}{\partial z} + K(h) \quad (2.3)$$

em que:

$\theta$  = teor de água no solo ( $\text{cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ );

$K(\theta)$  = condutividade hidráulica em função do teor de água do solo,  $\text{cm h}^{-1}$ ;

$K(h)$  = condutividade hidráulica em função potencial matricial, em  $\text{cm h}^{-1}$ .

As equações 2.2 e 2.3 são denominadas equações de Darcy-Buckingham.

O fluxo de água em solos não saturados, descrito pelas equações 2.2 e 2.3, é altamente dependente do conteúdo de água no solo. Segundo REICHARDT (1985), essa dependência faz com que o fluxo da água varie em função do teor de água e da condutividade hidráulica, sendo assim, afetada pela histerese. Esta histerese é causada pela geometria irregular dos poros, incluindo aprisionamento de bolhas de ar na matriz do solo, características de expansão e contração do solo e diferença no ângulo de contato durante os processos de secagem e umedecimento do solo (HILLEL, 1980; LIBARDI, 1995). Apesar da histerese afetar as propriedades dinâmicas e estáticas do solo este trabalho não considera seu efeito no movimento de água no solo.

### **2.3. A equação da continuidade**

Apenas o conhecimento do fluxo pela aplicação da equação de Darcy-Buckingham não é suficiente em estudos da dinâmica da água no solo (REICHARDT, 1985). Pelo fato de que esta equação não descreve a variação do teor de água no tempo, ela deve ser combinada com a equação de conservação de massa, conforme descrito por Richards, em 1928, e apresentada por outros autores (REICHARDT, 1985; HILLEL, 1980).

Considerando o conceito de volume elementar representativo (BEAR, 1979), que permite estabelecer uma concepção macroscópica sobre o movimento da água no solo. Com base nesse conceito o solo passa a ser considerado um meio poroso contínuo, no qual se admite que qualquer característica do solo ou do escoamento possa ser quantificada experimentalmente ou expressa por meio de funções matemáticas contínuas, pode-se aplicar o princípio da conservação de massa a um volume de controle

(REICHARDT, 1985; PREVEDELLO, 1996) e obter, para o movimento de água apenas na vertical, a equação:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial z} \quad (2.4)$$

em que:

t = tempo, em horas.

#### 2.4. Equação de Richards

A equação 2.4 combinada com a equação 2.3 resulta na clássica equação diferencial que descreve o movimento de água no solo, em regime não-permanente, conhecida como equação de Richards.

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(h) \left( \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad (2.5)$$

A partir do conceito de capacidade hídrica específica,  $E(h) = \partial \theta / \partial h$ , que representa a declividade da curva de retenção de água no solo e aplicando a regra da cadeia do lado esquerdo da equação 2.5, bem como acrescentando um termo fonte ou sumidouro de água ( $R_a$ ), a equação 2.5 torna-se:

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

em que:

$R_a$  = fonte ou extrator, em  $h^{-1}$ .

Como a capacidade hídrica específica e a condutividade hidráulica são funções do potencial matricial, “h”, a equação 2.6 é não-linear, necessitando ser linearizada ou de se fazer uso de técnicas numéricas para a sua solução.

A equação 2.6 foi resolvida pelo método das diferenças finitas, por COSTA (1988); CORRÊA (2001) e VIEIRA (2003).

O termo extrator ( $R_a$ ) pode ser usado para simular, por meio de uma função matemática, a extração de água pela planta ou representar a taxa evaporação média de água do solo ao longo de um tempo  $t$  qualquer.

Os modelos matemáticos, fundamentados na equação de Richards, requerem o conhecimento de características físico-hídricas do solo, como a condutividade hidráulica do solo não-saturado. Devido à dificuldade na determinação dessas características, elas são estimadas por funções contínuas que descrevem a relação  $\theta(h)$  e  $K(h)$ . O modelo SIMASS-C usa os modelos de Brooks e Corey e Van Genuchten (CORRÊA, 2001) para estimar  $\theta(h)$  e  $K(h)$ .

## 2.5. Estimativa da curva de retenção de água no solo e da condutividade hidráulica

BROOKS e COREY (1964) obtiveram uma relação entre a saturação efetiva, ( $S_e$ ) e o potencial matricial, representada na seguinte forma:

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = \left(\frac{h_b}{h}\right)^\gamma \quad \text{ou} \quad \theta = \theta_s + (\theta_s - \theta_r) \left(\frac{h_b}{h}\right)^\lambda \quad \text{para } h < h_b \quad (2.7)$$

e

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = 1 \quad \text{ou} \quad \theta = \theta_s \quad \text{para } h \geq h_b \quad (2.8)$$

em que:

$S_e$  = saturação efetiva, adimensional;

$h_b$  = potencial matricial de entrada de ar, em cm;

$\theta_r$  = umidade residual, em  $\text{cm}^{-3} \text{ cm}^{-3}$ ;

$\gamma$  = parâmetro de ajuste do modelo, relacionado à geometria do solo (adimensional).

De maneira semelhante, van GENUCHTEN (1980) propôs que  $S$  pode ser expressa pela equação:

$$Se = \left[ \frac{1}{1 + |\alpha h|^n} \right]^m \quad \text{ou} \quad \theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left[ 1 + |\alpha h|^n \right]^{-m} \quad \text{sendo } h \leq 0 \quad (2.9)$$

em que  $\alpha$  e  $n$  são parâmetros relacionados às propriedades do solo e  $m = 1 - 1/n$ .

Substituindo as equações 2.7 e 2.8 na equação proposta por BURDINE (1953), citado por VIEIRA (2003), obtêm-se a equação proposta por Brooks e Corey para estimar a condutividade hidráulica:

$$K(h) = K_o \left( \frac{h_b}{h} \right)^{n_{bc}} \quad \text{sendo } h < h_b \quad (2.10)$$

e

$$K(h) = K_o \quad \text{para } h \geq h_b \quad (2.11)$$

em que  $n_{bc} = 2 + 3\gamma$ .

Substituindo a equação 2.9 na equação proposta por MUALEM (1976), citado por VIEIRA (2003), obtêm-se a equação proposta por Van GENHUCTEN para estimar a condutividade hidráulica:

$$K(h) = K_o \frac{\left[ (1 - |\alpha h|^{n-1}) (1 + |\alpha h|^n)^{-m} \right]^2}{(1 + |\alpha h|^n)^{m/2}} \quad \text{sendo } h \geq 0 \quad (2.12)$$

A capacidade hídrica específica é obtida pelos dos modelos de Brooks e Corey e Van Genuchten, derivando-se as equações 2.7 e 2.9, respectivamente.

## 2.6. Transporte de solutos

Enquanto que os solutos se movimentam no solo, eles reagem entre si e interagem com a matriz do solo numa sucessão cíclica e contínua de processos físicos e químicos inter-relacionados (adsorção, desorção, mobilização, imobilização, precipitação e dissolução). Essas interações

envolvem e são geralmente influenciadas por uma série de fatores como acidez, temperatura, composição e concentração da solução do solo. Além disso, determinados solutos podem sofrer transformações biológicas pelos microrganismos do solo (PREVEDELLO, 1996).

Os solutos no solo podem se movimentar convectivamente (fluxo de massa), por dispersão e difusão, além de estarem sujeitos a outros processos de perdas e ganhos, como o de sorção e o de transformações químicas e, ou biológicas. Os processos de transformações a que os solutos estão sujeitos no solo são extremamente complexos e dependentes da natureza e propriedade de cada meio e soluto envolvido.

### **2.6.1. Transporte convectivo de solutos no solo**

O transporte convectivo, também denominado fluxo de massa e, algumas vezes chamado de fluxo de Buckingham-Darcy (diferença de potencial hidráulico), refere-se ao movimento passivo de um soluto juntamente com a água do solo, ou seja, a água e o soluto nela dissolvido movem-se à mesma velocidade (VIEIRA, 2003, MIRANDA, 2001; FERREIRA, 2001). Esse movimento é expresso pela equação:

$$J_m = qC = -C \times \left( K(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial z} \right) \quad (2.13)$$

em que:

$J_m$  = fluxo de massa do soluto,  $g \text{ cm}^{-2} \text{ h}^{-1}$ ;

$C$  = concentração do soluto na fase líquida do solo,  $g \text{ cm}^{-3}$ ;

### **2.6.2. Transporte difusivo de solutos no solo**

A difusão é um processo espontâneo, que resulta do movimento térmico dos íons e moléculas em solução (FERREIRA, 2001). A dispersão físico-química (difusão) ocorre comumente na fase líquida como resultado do movimento térmico ao acaso (movimento browniano) e repetidas colisões e deflexões de moléculas e íons (BEAR, 1979; PREVEDELLO, 1996). A difusão

decorre da diferença de concentrações entre pontos no solo, ou seja, em razão da existência de um gradiente de concentração e, conforme a lei de Fick, pode ser descrita por:

$$J_D = -\theta D_m \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2.14)$$

em que:

$J_D$  = fluxo de soluto devido à difusão,  $g\ cm^{-2}\ h^{-1}$ ;

$D_m$  = coeficiente de difusão iônica ou molecular,  $cm^2\ h^{-1}$ ;

Devido ao caminho tortuoso percorrido pela solução no solo, o valor de  $D_m$  nos solos é menor que o coeficiente de difusão em água pura ( $D_0$ ), podendo ser determinado por:

$$D_m = \tau D_0 \quad (2.15)$$

em que:

$\tau$  = fator de tortuosidade (adimensional);

$D_0$  = coeficiente de difusão molecular em água pura, em  $cm^2\ h^{-1}$ .

O mecanismo de difusão é afetado por diversos fatores. Quando o teor de água decresce, o espaço disponível à difusão também decresce, enquanto a tortuosidade do caminho aumenta. Segundo FERREIRA (2001), o fator de tortuosidade tem valores entre 0,3 e 0,7, para a maioria dos solos.

### **2.6.3. Transporte dispersivo de solutos no solo**

O processo de dispersão decorre do fato de as velocidades dentro de poros individuais e entre poros de diferentes formas, tamanhos e direções desviarem-se da velocidade média do escoamento no meio poroso (FERREIRA, 2001). Essa variação de velocidade dentro de poros individuais, em relação à velocidade média de avanço, faz com que o soluto seja

transportado em diferentes velocidades, junto à frente de avanço, resultando num processo de mistura, macroscopicamente semelhante àquela decorrente da difusão.

A dispersão produzida pelas variações de velocidade que ocorrem em nível microscópico, dentro do espaço poroso, é chamada *dispersão mecânica*. A dispersão que ocorre na ausência de movimento ou em velocidades muito baixas é atribuída à *difusão molecular* produzida pelo movimento aleatório das moléculas em um fluido, das zonas de alta concentração para as zonas de baixa concentração. O termo *dispersão hidrodinâmica* é utilizado para descrever a dispersão resultante dos dois fenômenos (FEITOSA e MANOEL FILHO, 1997).

A dispersão é um processo passivo que, diferentemente da difusão, só ocorre quando a solução do solo está movimentando-se, razão pela qual o termo dispersão mecânica é freqüentemente empregado para descrever a mistura causada pelo fluxo de massa (FERREIRA, 2001). O transporte dispersivo pode ser descrito por uma equação:

$$J_h = -\theta D_h \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2.16)$$

em que:

$J_h$  = fluxo de soluto devido a dispersão, em  $\text{g cm}^{-2} \text{h}^{-1}$ ;

$D_h$  = coeficiente de dispersão mecânica, em  $\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$ .

Esse coeficiente depende da velocidade da solução e da dispersividade do meio poroso, sendo estimado por:

$$D_h = \lambda v^{n^*} \quad (2.17)$$

em que:

$\lambda$  = dispersividade do solo, em cm;

$v$  = velocidade da solução ( $q/\theta$ ), em  $\text{cm h}^{-1}$ ;

$n^*$  = constante empírica, aproximadamente de 1,0.

De acordo com FERREIRA (2001), quando o solo é formado por material destorroado, o valor de  $\lambda$  situa-se em torno de 1 cm, ou menos. Quando o solo ou o material de solo encontra-se estruturado, o valor de  $\lambda$  pode ser duas a três vezes maior.

Em razão de serem macroscopicamente semelhantes (FERREIRA, 2001), os coeficientes de difusão e dispersão são freqüentemente considerados aditivos:

$$D = D_m + D_h \quad (2.18)$$

em que:

$D$  = coeficiente de dispersão hidrodinâmica, em  $\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$ .

Outras denominações freqüentemente dadas na literatura a  $D$  são: coeficiente de difusão aparente, coeficiente de difusão-dispersão e coeficiente dispersivo-difusivo (FERREIRA, 2001; HILLEL, 1980).

A combinação das equações (2.15), (2.14), (2.16) e (2.18), resultam na equação para o fluxo de solutos no solo, na direção vertical (CORRÊA, 2001).

$$J_s = -\theta D \frac{\partial C}{\partial z} + qC \quad (2.19)$$

em que:

$J_s$  = fluxo de soluto no solo, em  $\text{g cm}^{-2} \text{h}^{-1}$ .

O balanço de solutos em um volume de controle resulta na equação de conservação de massa descrita em CORRÊA (2001) por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\theta C + \rho_s S) = - \frac{\partial J_s}{\partial z} \quad (2.20)$$

em que:

$S$  = concentração do soluto adsorvida na fase sólida do solo, em  $\text{g g}^{-1}$ ;

$\rho_s$  = massa específica do solo, em  $\text{g cm}^{-3}$ .

Substituindo a equação (2.19) pela equação (2.20) tem-se a equação diferencial de balanço de solutos no solo, que fornece a concentração de soluto no solo no espaço e no tempo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C + \rho_s S) = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta D \frac{\partial C}{\partial z} - qC \right) \quad (2.21)$$

Os dois termos do lado esquerdo da equação (2.21) representam as mudanças nas concentrações do soluto associadas as fases líquida e sólida, respectivamente.

Além dos processos de convecção, dispersão mecânica e difusão molecular vários outros fenômenos podem alterar a concentração do soluto à medida que ele se move no meio poroso (FEITOSA e MANOEL FILHO, 1997). Assim, no estudo do movimento de um soluto no solo, deve-se levar em consideração reações como os processos de sorção, transformações biológicas, trocas iônicas, etc.

Os processos de sorção incluem adsorção e trocas iônicas (FEITOSA e MANOEL FILHO, 1997). Na *adsorção*, a substância sólida atrai, à sua superfície, partículas de uma substância dissolvida (soluto). Já as *trocias iônicas* são divididas em catiônicas e aniônicas. O processo pelo qual os cátions são atraídos para a região próxima à superfície de minerais de argila carregados negativamente, permanecendo aí retidos por forças eletrostáticas, é chamado *troca catiônica*. A *troca aniônica* ocorre em locais positivamente carregados como óxidos de ferro e alumínio, nas arestas de minerais de argila.

O processo de adsorção/dessorção é dinâmico: as moléculas são continuamente transferidas da solução do solo para as superfícies dos sólidos do solo e vice-versa. Compostos orgânicos e minerais podem ser adsorvidos por processos físico-químicos tais como Forças de Van der Waals, pontes de Hidrogênio, trocas iônicas, etc (BAILEY e WHITE, 1970).

A descrição da partição de uma substância química entre as fases líquida e sólida do solo é realizada por meio de equações denominadas de isotermas de adsorção, tais como as isotermas de Langmuir, de Freundlin e linear. As isotermas de sorção descrevem a relação de equilíbrio, em temperatura constante, entre a quantidade do soluto na solução e a quantidade

adsorvida na superfície dos sólidos (BAILEY e WHITE, 1970). Logo, a retenção é processo chave para a determinação do destino dos produtos químicos no sistema solo-água (STEHOUWER et al., 1994).

Na literatura, está apresentado grande número de isotermas que podem ser utilizadas para estimar a retenção de solutos no solo (HINZ et al., 1994). A isoterma de Freundlich é representada pela equação:

$$S = K_d C^{n_1} \quad (2.22)$$

em que  $K_d$  é o coeficiente de partição ou distribuição ( $\text{cm}^3 \text{g}^{-1}$ ) e  $n_1$  é uma constante empírica; considerando-se equilíbrio relativo à equação isoterma de Freundlich.

No entanto, para baixa concentração na solução pode-se admitir  $n > 1$ , isto é, a equação 2.22 torna-se linear, o que facilita as soluções matemáticas de problemas envolvendo processos de sorção.

Considerando a existência de equilíbrio linear de sorção, substituindo a equação (2.22) na equação (2.21) e acrescentando o termo fonte ou sumidouro de soluto ( $\Gamma$ ), obtém-se:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \theta D \frac{\partial C}{\partial z} - qC \right) + \Gamma \quad (2.23)$$

em que :

$$R = 1 + \frac{\rho_s k_d}{\theta} = \text{fator de retardamento} \quad (2.24)$$

$\Gamma$  = fonte ou sumidouro de soluto, em  $\text{g cm}^{-3} \text{h}^{-1}$ .

Quando não há qualquer interação entre o soluto adicionado e o solo, ou seja, meio poroso não-reativo,  $k_d$  é igual a zero e  $R = 1$ .

Os processos de entrada e saída de solutos (nitrato ou amônio) do sistema são contabilizados pelo termo fonte/sumidouro da equação de transporte de solutos. No modelo de transporte de solutos, o termo  $\Gamma$  inclui a extração de nitrogênio pela planta e os vários processos de transformação relacionados ao N no solo. O termo  $\Gamma$  pode ser dado por uma função ou

simplesmente pela quantidade adicionada ou retirada do sistema para dada profundidade e tempo. Considerando as transformações sofridas pelo nitrogênio no solo, pode-se definir o termo  $\Gamma$  como:

$$\Gamma = \Gamma_{\min} + \Gamma_{\text{adub}} + \Gamma_s + \Gamma_{\text{imob}} + \Gamma_{\text{den}} + \Gamma_{\text{am}} \quad (2.25)$$

em que:

$\Gamma_{\min}$  = função que representa a quantidade de nitrogênio proveniente da mineralização da matéria orgânica;

$\Gamma_{\text{adub}}$  = função que representa a quantidade de  $\text{NO}_3^-$  ou  $\text{NH}_4^+$  proveniente da adubação nitrogenada;

$\Gamma_s$  = função que representa a quantidade de soluto extraído pelas raízes da planta;

$\Gamma_{\text{imob}}$  = função que representa a quantidade de soluto imobilizado pelos microrganismos e, ou adsorvidos na matriz do solo;

$\Gamma_{\text{den}}$  = função que representa a quantidade de nitrogênio perdido por desnitrificação; e

$\Gamma_{\text{am}}$  = função que representa a quantidade de amônia ( $\text{NH}_3$ ) volatilizada.

Caso haja interesse em quantificar a lixiviação de  $\text{NO}_3^-$ , os dois primeiros termos ( $\Gamma_{\min}$  e  $\Gamma_{\text{adub}}$ ) da equação deverão ser positivos, pois são fontes de nitrato para o sistema, enquanto os demais termos são negativos, pois serão sumidouros de nitrato.

## 2.7. Transferência de calor no solo

A temperatura do solo é importante fator no crescimento e desenvolvimento vegetal. Alguns processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem no solo são afetados pela temperatura, tais como: balanço de energia na superfície, propriedades hidráulicas do solo, germinação das sementes, crescimento das raízes, absorção de água e nutrientes, difusão de solutos e gases, taxa de decomposição dos solutos, evaporação da água, atividade biológica dos microrganismos, intemperização de rochas e volatilização de

sais. Esses também influenciam indiretamente no crescimento e desenvolvimento da cultura. Ela também é um fator de grande importância no desenvolvimento dos microrganismos, intensificando ou retardando as atividades biológicas no solo. A temperatura é afetada pela composição mineralógica, densidade, umidade, cor da superfície, cobertura vegetal, estrutura e conteúdo de matéria orgânica do solo (REICHARDT, 1985).

Os processos de transferência de energia térmica no solo podem ser agrupados em três categorias: 1) radiação: processo de transferência de energia por radiações eletromagnéticas, principalmente na região do visível e infravermelho; 2) convecção: processo de transferência que ocorre quando existe fluidos em movimento (fluxo de massa), e 3) condução ou difusão térmica: processo de transferência por difusão de energia de regiões mais quentes para regiões mais frias. No solo, o processo de transferência por condução é o principal processo que ocorre.

Segundo REICHARDT (1985), a condução de calor no solo, considerada na direção vertical, é dada pela equação:

$$q_c = -\kappa(\theta) \frac{\partial T}{\partial z} \quad (2.26)$$

em que:

$q_c$  = fluxo de calor no solo, em  $\text{cal cm}^{-2} \text{h}^{-1}$ ;

$\kappa(\theta)$  = condutividade térmica do solo, em  $\text{cal cm}^{-1} \text{h}^{-1} \text{°C}^{-1}$ ;

$T$  = temperatura do solo, em  $\text{°C}$ .

Como foi mostrado para o fluxo de água no solo, desejando-se estudar a variação da quantidade de calor em dado ponto no solo, em função do tempo, deve-se utilizar a equação da continuidade (PREVEDELLO, 1996; REICHARDT, 1985). Considerando as leis da calorimetria, conforme descrito por REICHARDT (1985), e resolvendo a equação 2.26 analogamente ao descrito para a equação de Richards, chega-se à equação que descreve o fluxo de calor no solo. O fluxo de calor no solo, na direção vertical, é expresso por :

$$C_h \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ \kappa(\theta) \frac{\partial T}{\partial z} \right] \quad (2.27)$$

em que

$C_h$  = calor específico volumétrico do solo, em  $\text{cal cm}^{-3} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ ;

Os valores de “ $C_h$ ” e “ $\kappa$ ” não são constantes com a variação do teor de água no solo.

Na forma escrita acima, a equação (2.27) pode ser resolvida por métodos numéricos ou por meio de linearização da função. Assim, outros métodos, mais simplificados, foram propostos para resolução dessa equação. VAN WIJK e DE VRIES (1963), citados por WU e NOFZIGER (1999), e ELIAS (2004) propuseram um modelo analítico, unidimensional e vertical, partindo do pressuposto que os valores de “ $C_h$ ” e “ $\kappa$ ” são constantes. Conseqüentemente, a equação (2.27) torna-se:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D_c \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (2.28)$$

em que  $D_c = \kappa/C_h$  é a difusividade térmica do solo ( $\text{cm}^2 \text{ h}^{-1}$ ), considerada constante no tempo e em profundidade. Reflete a taxa com que um dado solo transmite calor.

A resolução analítica da equação 2.28 é descrita por ELIAS (2004). Segundo o autor, a equação analítica mostra que a temperatura decresce exponencialmente com o aumento da profundidade do solo e varia senoidalmente com o tempo (RICHARDT, 1985; PREVEDELLO, 1996). Assume ainda que a superfície do solo não é vegetada, que o solo é homogêneo, exposto a radiação solar. Maiores detalhes desse modelo estão descritos por KIRKHAM e POWERS (1972), HILLEL (1980) e ELIAS (2004).

### 2.7.1. Propriedades térmicas do solo

O calor específico do solo ( $C_h$ ) representa a quantidade de calor necessária para aumentar a temperatura de um volume unitário em  $1^\circ \text{C}$  (HILLEL, 1980). O calor específico do solo depende da composição da fase

sólida (constituintes minerais e orgânicos presentes), da densidade do solo e do teor de água no solo (Tabela 1).

**Tabela 1-** Densidade, calor específico e condutividade térmica de constituintes do solo.

Constituinte	Massa específica	Calor específico	Condutividade térmica
	(g cm <sup>-3</sup> )	(cal cm <sup>-3</sup> °C <sup>-1</sup> )	(cal cm <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> °C <sup>-1</sup> )
Quartzo	2,66	0,48	21
Mat. orgânica	1,3	0,6	0,6
Água	1,0	1,0	1,37
ar	0,00125	0,003	0,06

Fonte: Hillel (1980).

A condutividade térmica ( $\kappa$ ) é a quantidade de energia térmica que o solo pode transmitir por unidade de tempo, por unidade de comprimento, quando a diferença de temperatura nessa distância é de 1 °C. É influenciada por fatores como a massa específica e o conteúdo de água no solo (HILLEL, 1980).

Dos constituintes do solo, o quartzo apresenta o maior valor de “ $\kappa$ ” enquanto a matéria orgânica, o menor valor. A condutividade térmica aumenta com o aumento do conteúdo de água no solo.

A condutividade térmica do solo depende da sua composição mineral, da matéria orgânica e teor de água e de ar no meio poroso. Visto que a condutividade térmica do ar é muito menor que da água e dos sólidos, maior quantidade de ar no meio poroso reduz a condutividade térmica. Portanto, se a proporção de água e ar variar continuamente o valor de “ $\kappa$ ” também variará com o tempo. A composição do solo é raramente uniforme em profundidade. Por essa razão “ $\kappa$ ” é geralmente função da profundidade e do tempo. Dentro de um intervalo de conteúdo de água no solo normalmente encontrado em campo, o valor de  $C_h$  (calor específico) pode sofrer variações da ordem de três a quatro vezes o seu valor, enquanto “ $\kappa$ ” pode sofrer variações de cem vezes ou mais (HILLEL, 1980).

A maior parte da energia recebida pelo solo ocorre durante o dia que, por sua vez a perde durante a noite por radiação e convecção. O efeito da energia ganha ou perdida na temperatura do solo é maior na superfície e decresce em profundidade (HILLEL, 1980).

Devido à alternância de períodos de aquecimento e esfriamento na superfície do solo, causada pela presença e ausência da radiação solar, há períodos alternados de aquecimento e esfriamento em todas as profundidades, ao longo das camadas do solo.

Estudaram a temperatura do solo, RAO e VIANELLO (1977) citados por ELIAS (2004), verificaram que a variação diária e a anual da temperatura segue aproximadamente um movimento periódico amortecido, no qual uma temperatura senoidal amortecida oscila em torno de um valor médio e constante. Porém, a difusão parcial da energia solar por ventos e nuvens causam desvios nessa periodicidade, os quais são mais acentuados próximo e na superfície do solo e menos intensos às maiores profundidades, para a onda de oscilação diária de temperatura (DECICO, 1974). Entretanto, se o período experimental for longo, como a onda anual da temperatura, essas perturbações transitórias tendem a desaparecer.

COSTA e GODOY (1962), citados por SCHENEIDER (1979), analisaram a onda diária da temperatura de um solo de Ribeirão Preto, SP. Verificaram que o as temperaturas máxima e mínima ocorrem, respectivamente, às 13h e às 5h na profundidade de 2 cm, e às 15h:30 mim e 7h:30 mim na profundidade de 10 cm, e que as amplitudes térmicas diárias, nessas respectivas profundidades, foram de 16,6 e 11,4 °C.

A onda de oscilação diária da temperatura é rapidamente reduzida com a profundidade e, a aproximadamente 40 cm, praticamente não existe amplitude térmica diária. DECICO (1974) determinou a profundidade de extinção da onda de oscilação diária em diferentes solos e observou que 60 cm foi a profundidade encontrado durante o ano.

HORTON et al. (1983) enfatizaram o fato de que os modelos analíticos, embora sejam válidos apenas como aproximações, têm sido muito úteis por fornecerem um discernimento físico do processo de transferência de energia no solo. A modelagem descrita por VAN WIJK e DE VRIES (1963), citados por ELIAS (2004), é freqüentemente mencionada em livros-texto de física do solo,

provavelmente porque o discernimento físico e a simplicidade têm valor educacional considerável, além da utilidade científica.

Diversos autores trabalharam com modelagem analítica de maior complexidade. PARTON e LOGAN (1981) verificaram que a temperatura superficial do solo é mais bem descrita por uma função senóide truncada para prever a temperatura durante o dia, e uma função exponencial para prever a temperatura durante a noite. MASSMAN (1993) estudou algumas soluções analíticas aproximadas para a equação do fluxo linear de calor, para o caso em que a difusividade térmica não é constante.

HANKS et al. (1971) e WIERENGA e WIT (1970) desenvolveram modelos em diferenças finitas, e programas computacionais correspondentes, para solucionar problemas dados pela equação de fluxo linear de calor. Outras abordagens para modelos em diferenças finitas foram apresentadas por MOROIZUMI e HONIRO (2002). HORTON e CHUNG (1991), citados por ELIAS (2004). Eles apresentaram um programa computacional para cálculos numéricos de fluxo de água e calor, combinados. Estes modelos apresentam menos limitações do que os analíticos, pois a equação do fluxo de calor pode ser resolvida para um caso geral, ou seja, para simular a condição de campo arbitrária, sem necessidade de fazer suposições sobre a difusividade térmica do solo ou sobre a periodicidade da temperatura na superfície.

## **2.8. Ciclo do Nitrogênio no solo**

O ciclo do nitrogênio no solo envolve os seguintes processos: mineralização, imobilização, nitrificação, desnitrificação e volatilização. Cada um deles apresenta características particulares e estão intimamente relacionados, como será descrito a seguir.

### **2.8.1. Mineralização**

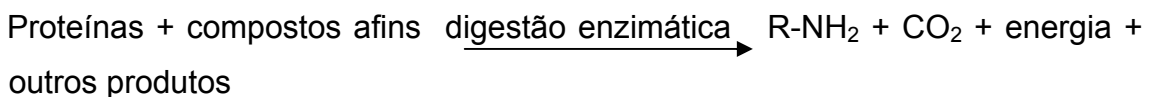
A mineralização é a conversão de elementos ligados organicamente (C, N, P) para a forma mineral, em compostos inorgânicos ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{HPO}_4^{2-}$ )

(STEVESON, 1986), ou seja, é a transformação de formas orgânicas, não absorvível pelas plantas, para formas inorgânicas absorvíveis pelas plantas.

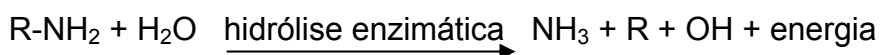
A duração e a taxa de mineralização são afetadas por fatores como a composição da substância em decomposição, temperatura, teor de água, pH e atividade biológica do solo (TISDALE et al., 1985). A mineralização de compostos orgânicos nitrogenados ocorre essencialmente por duas reações: aminação e amonificação.

Na primeira etapa, a população de microrganismos heterotróficos composta por vários grupos de bactérias e fungos é a responsável pelas reações de decomposição do nitrogênio orgânico.

Em pH neutro ou próximo desse, a quebra das proteínas é realizada predominantemente pelas bactérias, envolvendo também alguns grupos de fungos e actinomicetos. Em meio ácido, predominam os fungos. A etapa final de decomposição do nitrogênio orgânico é a decomposição hidrolítica da proteína, liberando aminas e aminoácidos. Esse passo é denominado aminação, depende de microrganismos heterotróficos, e dá início ao processo de mineralização (TISDALE et al., 1985). A aminação pode ser representada esquematicamente da seguinte forma:



As aminas e aminoácidos liberados pela aminação são rapidamente utilizados por outro grupo de microrganismos heterotróficos, os quais liberam amônia. Esta etapa de amonificação pode ser representada da seguinte forma:



A aminação e a amonificação são promovidas por microrganismos heterotróficos que utilizam substâncias orgânicas como fonte de carbono e energia. Nessas reações, as populações de bactérias, fungos e actinomicetos liberam amônio. Esta população de amonificadores é composta por microrganismos aeróbios e anaeróbios (TISDALE et al., 1985). O amônio liberado no solo pode ser: absorvido em quantidades razoáveis por alguns dos

próprios amonificadores ou por outros microrganismos capazes de utilizá-lo; absorvido por vegetais que, em sua maioria, têm a capacidade de absorvê-lo diretamente; adsorvido aos minerais de argila, passando a fazer parte do complexo de troca do solo; fixado no solo pela sua inclusão entre as lâminas dos minerais de argila do tipo 2:1, tornando-se, desta maneira, indisponível para as plantas e/ou oxidado a nitrato por certas espécies de bactérias quimiolitotróficas que o utilizam como fonte de energia, iniciando assim o processo de nitrificação.

A mineralização líquida é o resultado do balanço entre a mineralização e a imobilização, que é afetada, entre outros fatores, pela relação C:N do substrato. Uma baixa relação C: N geralmente resulta em mineralização líquida e promove uma alta taxa de decomposição (PAUL e CLARK, 1989; TISDALE et al., 1985). Entretanto, segundo VINTEN e SMITH (1993), não há um valor bem definido para a relação C:N que marque o ponto em que a mineralização será maior que a imobilização. Segundo os autores, isso é devido ao fato que outros aspectos da qualidade do substrato, como teor de lignina e polifenóis, que podem interferir na taxa de decomposição.

Outro fator importante para a atividade e crescimento da população microbiana dos solos é o potencial da água no solo, mais precisamente o potencial matricial e o potencial osmótico. Ambos podem medir a energia livre da água no solo, ou seja, a água fica menos disponível aos microrganismos, dificultando-lhes a atividade e crescimento (MOREIRA e SIQUEIRA, 2002).

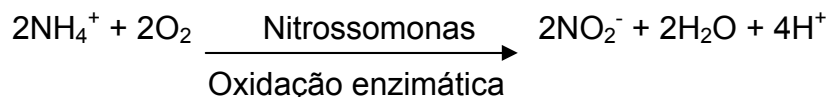
Em resumo, a taxa de mineralização das formas orgânicas de N geralmente aumenta com o aumento do teor de água no solo, entre o ponto de murcha e a capacidade de campo. Nesta última situação, pode ocorrer microsítios anaeróbios e, conseqüentemente, desnitrificação. Se o teor de água está muito acima da capacidade de campo, a taxa de mineralização cai devido à anaerobiose, pois a taxa de decomposição por bactérias aeróbias é muito maior do que a de bactérias anaeróbias; aquelas são mais eficientes energeticamente (MOREIRA e SIQUEIRA, 2002). Quanto ao teor de água do solo ótima para a mineralização, não há concordância entre autores mas, segundo SIERRA (1997), ela está em torno da tensão de 30 kPa, ou seja, próximo à capacidade de campo.

Não é somente o teor de água no solo que é importante, mas também a sua variação temporária, isto é, os ciclos de secagem e umedecimento do solo têm profundo efeito na taxa de mineralização. Há evidências que o reumedecimento do solo aumenta a atividade microbológica no solo, a qual está associada com o aumento da população microbiana (CAMPBELL e BIEDERBECK, 1982). Esse estímulo deve-se a mineralização dos microrganismos mortos, com baixa relação C:N, durante o período de secagem do solo e à matéria orgânica do solo recentemente exposta ao ataque dos microrganismos.

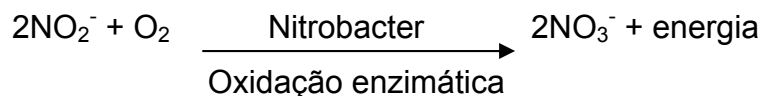
### 2.8.2. Nitrificação

O processo de oxidação do amônio a nitrato é realizado por diferentes grupos de microrganismos quimioautotróficos, que obtêm energia pela oxidação de substratos inorgânicos, a partir do CO<sub>2</sub> do ar. A nitrificação ocorre em duas etapas:

- a) Nitritação: é a transformação de amônio em nitrito, desencadeada por bactérias do gênero *Nitrosomonas*, *Nitrosospira* e *Nitrosococcus* (PAUL e CLARK, 1989), por meio da seguinte reação:



- b) Nitratação: é a transformação de nitrito a nitrato, desencadeada por bactérias do gênero *Nitrobacter*, *Nitrospira*, *Nitrococcus* (PAUL e CLARK, 1989), por meio da reação:



Três aspectos importantes e práticos evidenciados pelas reações de nitrificação citadas acima. Em primeiro lugar, a reação necessita de oxigênio. Conseqüentemente ela é intensa em solos bem aerados. O segundo aspecto é a liberação de íons H<sup>+</sup>. Isto explica a acidificação do solo, quando fertilizantes amoniacais ou orgânicos são adicionados ao solo e são convertidos a nitrato. O terceiro aspecto importante é que devido à participação da atividade

microbiana, a intensidade e a extensão das transformações serão grandemente influenciadas pelas condições ambientais do solo, as quais afetam os microrganismos responsáveis por essas reações.

O nitrato disponível no solo pode ser absorvido pelas plantas; ser reutilizado pela atividade microbiana do solo, caso ocorram condições favoráveis à imobilização; ser perdido por desnitrificação, em condições de baixa concentração de oxigênio; ser adsorvido ao complexo de troca do solo; ou ser lixiviado.

A nitrificação depende da presença de oxigênio, pois é um processo de oxidação. Por isso, qualquer procedimento capaz de aumentar a aeração de um solo tende a acelerar a taxa de nitrificação. A difusão de O<sub>2</sub> no solo e, conseqüentemente, a aeração, é controlada por fatores como umidade e estrutura do solo. Considerando que a difusão de O<sub>2</sub> na água é de aproximadamente dez mil vezes menor que no ar (FERREIRA, 2002), e que a concentração de O<sub>2</sub> na água é muito baixa, pode-se dizer que as trocas gasosas entre a atmosfera interna e externa em um solo saturado praticamente não existe. Neste caso, a decomposição de resíduos orgânicos, antes realizada em sua maior parte por microrganismos aeróbios, passa a se feita por outro grupo de microrganismos, os anaeróbios, que estão em menor número.

A temperatura mais favorável para o processo de nitrificação está em torno de 26°C. O processo é lento quando a temperatura está abaixo de 5°C ou acima de 40°C (PAUL e CLARK, 1989). Segundo SIQUEIRA e MOREIRA (2002), a temperatura mais favorável à nitrificação situa-se entre 26 e 32 °C, cessando acima de 51°C e abaixo de 5 °C.

O valor de pH ótimo para o crescimento dos microrganismos, segundo PAUL e CLARK (1989), está entre 6,6 e 8,0. Assim, a calagem contribui para o aumento da nitrificação. Em solos ácidos, a população dos grupos *Nitrosomonas* e *Nitrobacter* é pequena e sua atividade muitas vezes sequer é detectada. Em solo ácido de cerrado, HAYATSU e KOSUGE (1993) verificaram que o suprimento de N, na forma de uréia, e a calagem causaram aumento na população de bactérias autotróficas nitrificadoras, o que resultou em incremento na taxa de nitrificação.

A adição de fertilizantes nitrogenados amoniacais, como sulfato de amônio, serve como fonte de substrato aos microrganismos, favorecendo a

nitrificação do amônio. Por outro lado, a reação de nitrificação diminuiu o pH do solo, podendo inibir a nitrificação (STRONG et al., 1997), devido à redução da nitrificação em baixo pH. HAYNES (1986) cita que em áreas com fertilização intensiva de nitrogênio, aplicações de até 300 mg de N, a nitrificação aumentou e, nas aplicações superiores a essa quantidade a nitrificação foi reduzida. Nessas condições, a amônia formada foi tóxica à *Nitrobacter*, sem exercer influência prejudicial à *Nitrosomonas* (MISRA et al., 1974b). Como resultado, pode ocorrer acúmulo de nitrito no solo.

### 2.8.3. Desnitrificação

Na respiração, realizado pela grande maioria dos microrganismos do solo, o oxigênio atua como aceptor de elétrons no final da cadeia respiratória, para a produção de energia na forma de ATP. Porém, algumas populações de bactérias podem utilizar o nitrato como aceptor de elétrons, em ambientes saturados ou mal drenados, onde há falta de oxigênio (VICTÓRIA et al., 2002).

Esse processo de respiração anaeróbia é denominado de desnitrificação e, em certos sistemas de produção, as perdas de nitrato por desnitrificação podem ser expressivas (CERETTA e FRIES, 1998). As bactérias desnitrificantes mais comuns presentes no solo são: *Pseudomonas*, *Bacillus*, *Alcaligenes* e *Propionivbacterium* (PAUL e CLARK, 1989).

PILOT e PRATICK (1972) observaram indícios de desnitrificação em solos aerados. Segundo os autores, isso pode ser explicado por restrições temporárias de oxigênio (como ocorre após a irrigação) ou a adição de uma fonte de energia prontamente disponível.

Estimativas da quantidade de N perdido por desnitrificação em áreas agricultáveis diferem grandemente. Algumas estimativas de perdas por desnitrificação durante o estágio de crescimento das culturas em diferentes países, feitas por NIEDER et al. (1989), citados por VINTEN e SMITH (1993), vão de 2,5% a mais de 50 % do nitrogênio aplicado no solo.

A desnitrificação no subsolo tem sido estudada para ser utilizada para reduzir as perdas com a lixiviação de nitrato.

A taxa de desnitrificação está correlacionada com a concentração de nitrato no solo. Taxas relativamente altas de nitrato ( $> 0,2 \text{ kg ha}^{-1} \text{ d}^{-1}$ ) estão

associadas com teores de nitrato no solo superiores a  $5 \text{ mg kg}^{-1}$ . Em concentrações de  $\text{N-NO}_3^-$  superiores a  $20 \text{ } \mu\text{g L}^{-1}$ , a desnitrificação é independente da quantidade de  $\text{NO}_3^-$  presente no meio. Neste caso, a taxa de desnitrificação é determinada pela disponibilidade de carbono metabolizável. Em baixas concentrações de  $\text{NO}_3^-$ , a cinética parece ser de primeira ordem (VINTEN e SMITH, 1993). Em baixos níveis de  $\text{NO}_3^-$ , em solos úmidos, o fator determinante também pode ser a taxa de difusão de  $\text{NO}_3^-$  para o local da desnitrificação (STRONG e FILLERY, 2002).

Muitos estudos têm demonstrado que a desnitrificação está correlacionada com o conteúdo de água no solo. EGGINTON e SMITH (1986) verificaram que a aplicação de 50 mm de água em pastagem que havia recebido 100 kg de nitrogênio na forma de nitrato resultou em taxa máxima de desnitrificação superior a  $2 \text{ kg ha}^{-1} \text{ d}^{-1}$ . O estabelecimento de um valor de concentração crítica de oxigênio no solo no qual irá ocorrer a desnitrificação é difícil, pois depende de complicada relação entre o tamanho de agregados, a taxa de difusão de oxigênio (relacionado com o conteúdo de água no solo) e a taxa de respiração dos microrganismos no solo (que, por sua vez, depende da disponibilidade de carbono).

#### **2.8.4. Aspectos microbiológicos**

Os microrganismos do solo necessitam de água para absorção de nutrientes e para manutenção do metabolismo celular. A água é importante para o movimento dos microrganismos unicelulares (que ficam restritos aos filmes de água em torno da superfície das partículas do solo). Fungos filamentosos e actinomicetos não dependem desse filme de água, pois podem movimentar em regiões não saturadas. BURNS (1989), citado por MOREIRA e SIQUEIRA (2002), observou que os filmes de água formados na superfície das partículas são os principais sítios de atividade microbiana. Além disso, o movimento da água no solo, seja por difusão, dispersão ou fluxo de massa, permite o movimento dos substratos e produtos tóxicos no solo, tornando-os mais absorvíveis para os microrganismos. Os ciclos de molhamento e secagem do solo ajudam na liberação de substratos adsorvidos nas partículas de argila e/ou de células mortas presentes no solo (ocorridas durante o período de

secagem), estimulando-lhe a atividade biológica (CAMPBELL e BIEDERBECK, 1982). Logo, é de se esperar que em áreas irrigadas esse processo seja acelerado devido à maior frequência dos ciclos umedecimento e secagem do solo.

O solo é um sistema trifásico, bastante complexo, no qual há a formação de microsítios favoráveis à atividade de microrganismos. DE BOER et al (1991) relataram a existência de células adaptadas que podem manter suas atividades, mesmo em condições de baixo pH quando presente em altas densidades (aglomerados). Isto porque os biofilmes e as substâncias extracelulares nas quais as bactérias se encontram aderidas servem como proteção, proporcionando condições sustentáveis para a atividade microbiana (PROSSER, 1989).

## **2.9. Transporte de nitrogênio considerando as transformações biológicas**

A complexidade do ciclo do nitrogênio no solo torna difícil sua modelagem em termos matemáticos, uma vez que a maioria dos processos observados no seu ciclo são transitórios e podem ocorrer simultaneamente.

Muitos modelos de mineralização levam em consideração os graus de resistência dos resíduos à decomposição pelos microrganismos, o que torna necessário subdividi-los em compartimentos. Os compartimentos ativos (lábeis) referem-se aos resíduos facilmente decompostos (menos de um ano) e os compartimentos estáveis (recalcitrante), aos que levam anos para se decompor (VAZ DA SILVA e PASQUAL, 1999). Esta aproximação é uma tentativa de dividir os substratos orgânicos do solo de acordo com a disponibilidade para a biomassa microbiana. Assim, os compostos orgânicos que contêm proteínas e açúcares são mais lábeis do que aqueles ricos em lignina e substâncias húmicas.

A descrição quantitativa do movimento do nitrogênio no perfil do solo deverá incluir, além das reações físicas e químicas, as reações biológicas envolvidas (STARR, 1983). Estas reações biológicas são consideradas no termo fonte ou sumidouro da equação 2.23, de transporte de solutos no solo.

O conhecimento sobre os fatores físicos e químicos que influenciam o movimento de nitrogênio no solo está muito mais avançado do que os que

consideram esses processos conjuntamente com as reações microbiológicas do solo e fisiológicas da planta (mineralização, nitrificação, desnitrificação, volatilização, imobilização e absorção). Alguns autores empregam modelos empíricos e outros empregam modelos mecanísticos para descrever essas reações biológicas. A equação geral usada para descrever, em uma dimensão, a variação da concentração de soluto durante o processo de transporte de nitrogênio, considerando as reações biológicas de forma irreversível, pode ser descrita pela equação 2.23. O termo  $\Gamma_{ij}$  representa a taxa na qual a quantidade das diversas formas de nitrogênio está sendo produzida (+) ou consumida (-).

Soluções analíticas e numéricas da equação 2.23, para várias condições iniciais e de contorno, estão disponíveis na literatura envolvendo uma ou mais reações do nitrogênio no solo (MCLAREN, 1969, CHO, 1971; MISRA et al., 1974a). A maioria das soluções para a equação 2.23, aplicadas ao movimento de nitrogênio no solo sem a presença da cultura, foram desenvolvidas para condições de umidade e velocidade da água constantes, ou seja, fluxo constante (solo saturado). Nesses casos, as cinéticas (equações que descrevem a concentração do soluto no tempo) para a nitrificação e desnitrificação são, normalmente, consideradas de primeira ordem, isto é,  $\Gamma_i = -k_i \cdot C_i$ , em que  $k_i$  é a taxa da reação adotada por MCLAREN (1969); CHO (1971); MISRA et al. (1974b) e STARR et al. (1983); ou cinética de ordem zero, isto é,  $\Gamma_i = -k_i$  (PARLANGE et al., 1982).

Segundo REICHARDT (1986), dependendo das condições de fluxo em dado sistema, pode haver difusão, fluxo de massa, etc. Por exemplo, se o fluxo de massa for intenso e o coeficiente de difusão muito pequeno, este pode ser desprezado. Com fluxo zero, a difusão passa a ser o mecanismo mais importante. Para nutrientes, como o fósforo, altamente adsorvido à fração sólida, o componente de adsorção tem grande importância; para elementos como  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$  ela pode ser desprezível ou nulo, principalmente em solos com predominância de cargas negativas.

A equação 2.23 pode tornar-se ainda mais abrangente quando o soluto em questão ainda sofre transformações biológicas, como é o caso do nitrogênio que, além de sofrer os processos de difusão e fluxo de massa, pode se transformar por ação microbiológica. WAGENET et al. (1977) e MISRA et al.

(1974c) utilizaram a equação de transporte de solutos, considerando as reações sofridas pelo nitrogênio. Mc LAREN (1973), citado por STARR (1983), propôs um modelo na qual a taxa com que um dado substrato  $C_n$  é utilizado pelos microrganismos pode ser expressa por:

$$-\frac{\partial C_n}{\partial t} = + A \frac{dm}{dt} + \alpha m + \beta m \quad (2.29)$$

em que:

$m$  = biomassa

$A$ ,  $\alpha$  e  $\beta$  = coeficientes relacionado com o crescimento, manutenção e perda do substrato, respectivamente.

O primeiro termo do lado direito da equação 2.29 representa o crescimento da biomassa microbiana. O segundo termo do lado direito da equação 2.29 indica o substrato utilizado para manutenção da biomassa, na ausência de crescimento mesma. O terceiro termo representa a perda do substrato. Existem ainda modelos que consideram a taxa de mortalidade dos microrganismos e a eficiência com que eles utilizam o substrato. Apesar do embasamento teórico desses modelos, os parâmetros de entrada limitam seu uso.

Se for considerada a condição de fluxo constante e a biomassa “ $m$ ” for constante, então a concentração do substrato  $C_n$  qualquer (nitrato ou amônio) a variação na concentração pode ser estimada utilizando-se a equação de Michaelis-Menten, conforme apresentada por Mc LAREN (1973). citado por STARR (1983):

$$\frac{\partial C_n}{\partial t} = -\frac{k_m C_n}{K' + C_n} \quad (2.30)$$

em que  $k_m$  e  $K'$  são constantes. Com relação à aplicação, a equação 2.30 é inserida dentro da equação 2.23 com  $\Gamma_i = \partial C/\partial t$ . O termo  $k_m$  é considerado taxa de máximo crescimento do substrato e  $K'$  é a concentração do substrato, equivalente à metade da taxa de crescimento máximo ( $K' = \frac{1}{2} K_m$ ). No entanto,

em certas situações em que  $K' \ll C_n$  ou  $K' \gg C_n$ , o uso respectivo de equações de a cinética de primeira ou ordem zero torna-se apropriado.

Para simplificar o número de atributos de entrada, alguns autores fazem uma abordagem mais simples para determinar a taxa de decomposição ( $\partial C_n / \partial t$ ), adotando uma cinética de ordem zero, em que a taxa de decomposição não é afetada pela concentração do substrato (PAUL e CLARK, 1989).

$$\frac{\partial C_n}{\partial t} = k \quad (2.31)$$

O valor de “k” é *negativo* (taxa decrescente com o tempo), quando se refere ao  $N-NH_4^+$ , e *positivo* (taxa crescente) quando se refere a  $N-NO_3^-$ .

Integrando à equação, torna-se:

$$C_n = C_0 + (k \cdot t) \quad (2.32)$$

em que k é a constante da cinética de ordem zero, a qual é afetada por fatores ambientais:  $C_n$ , concentração do substrato ( $N-NH_4^+$  ou  $N-NO_3^-$ ) no tempo t;  $C_0$ , concentração inicial desses íons no substrato.

Alguns modelos consideram que a  $\partial C_n / \partial t$  obedece a cinética de primeira ordem, ou seja, a taxa de transformação do substrato é proporcional a sua concentração:

$$\frac{\partial C_n}{\partial t} = k \cdot C_n \quad (2.33)$$

integrando a equação obtêm-se:

$$C_n = C_0 \cdot e^{k \cdot t} \quad (2.34)$$

Com as abordagens da cinética de ordem zero e de primeira ordem assume-se que os microrganismos têm potencial de crescimento ilimitado para

a decomposição do substrato. Na cinética de zero ordem assume-se, também, que a taxa de decomposição seja independente da quantidade de substrato presente no solo (HANSEN et al., 1995).

Mc LAREN (1969) e MISRA (1974b, 1974c) empregaram a técnica de fluidos miscíveis para estudar o transporte de  $\text{N-NH}_4^+$  e  $\text{N-NO}_3^-$  em colunas de solo. Os autores analisaram o transporte, em condições transiente e constante, para estimar a distribuição de  $\text{N-NH}_4^+$  e  $\text{N-NO}_3^-$  durante lixiviações contínuas (fluxo constante) com solução de sais de amônio, na ausência de íons trocáveis e difusão. Eles assumiram que a seqüência das transformações biológicas ocorreram segundo a cinética de primeira ordem.

Na agricultura irrigada, os fertilizantes são freqüentemente aplicados via solução (fertirrigação) e, nestas condições, é interessante entender e estimar a concentração das diversas formas de nitrogênio, em função do tempo, em profundidade no solo. Assim, a estimativa da concentração do nitrogênio pode ser feita por meio da equação de transporte de solutos e, havendo interesse em considerar as reações do nitrogênio, pode-se utilizar o termo fonte ou sumidouro, considerando uma das funções cinéticas citadas acima.

### 3. MATERIAIS E MÉTODOS

Foram conduzidos dois experimentos em laboratório; o primeiro, em câmaras de incubação (B.O.D's) para avaliar a mineralização e a nitrificação, e o segundo, em colunas de solo, para avaliar o transporte de água e soluto, e testar o modelo SIMASS-C modificado.

#### 3.1. Descrição do modelo físico

O modelo computacional SIMASS-C (Simulação do Movimento de Água e Solutos no Solo considerando a presença de Cultura) foi desenvolvido por COSTA (1998) e permite simular o transporte de água e solutos no solo, sob condições de escoamento não-permanente, na vertical. Posteriormente, CORRÊA (2001) modificou o modelo e permitiu que se considerasse a extração de água e solutos pela cultura. Por último, foi incorporado ao modelo um módulo que permite simular o crescimento e desenvolvimento da cultura do milho (WOLSCHICK, 2004). Apesar do grande avanço dados por esses pesquisadores, alguns processos físicos, químicos e biológicos ainda precisam ser acrescentados ao modelo.

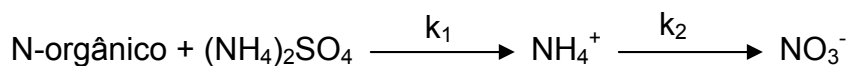
No transporte de formas iônicas do nitrogênio ocorrem reações enzimáticas e biológicas que não devem ser desconsideradas. Por isso, no estudo da movimentação do íon amônio ( $\text{NH}_4^+$ ) no solo, deve-se levar em consideração as perdas por volatilização, imobilização, nitrificação, além dos mecanismos físicos e químicos de dispersão, convecção, sorção. Se o soluto de interesse for o íon nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ), deve-se incluir o processo movimentação

no solo, processos de formação (ganho), a partir da oxidação do amônio bem como o processo de sua perda por redução a  $N_2O$  e, ou  $N_2$ , por desnitrificação.

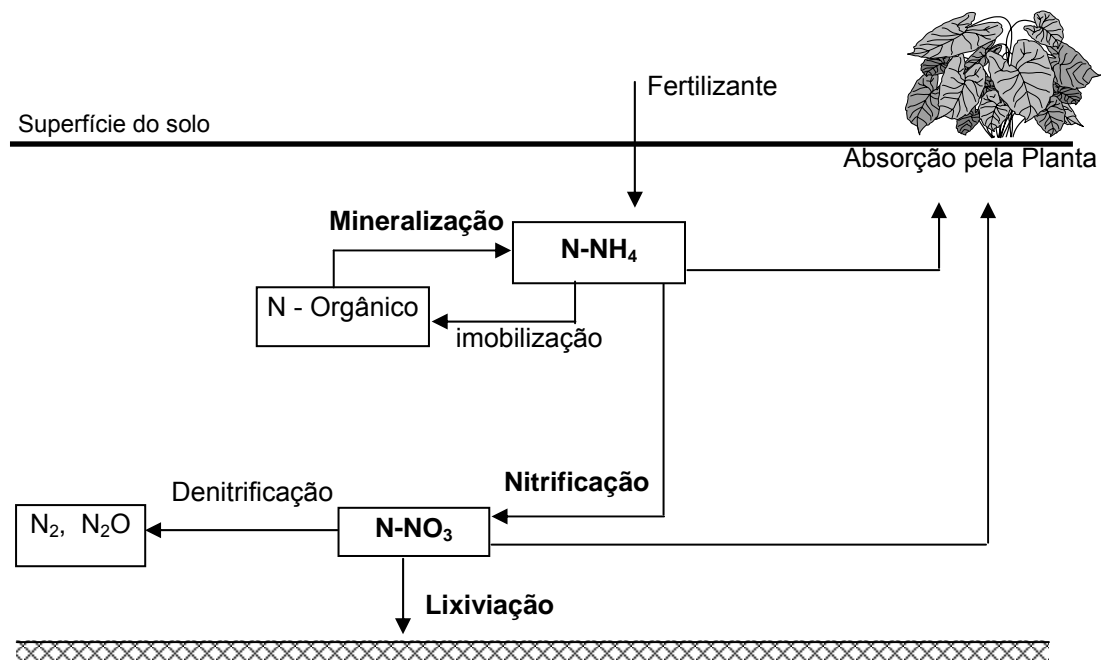
Neste trabalho é incluído no SIMASS-C os processos de mineralização líquida/ dissolução do amônio e nitrificação líquida e o efeito da temperatura e teor de água do solo nas reações biológicas, no entanto, as perdas por volatilização e desnitrificação.

Na Figura 1 está apresentado, de forma simplificada, o ciclo do nitrogênio no solo, com as principais reações envolvidas. Os termos em **negrito**, representam os processos que foram incluídos no modelo SIMASS\_C.

As transformações do nitrogênio, consideradas neste modelo, ocorrem segundo o esquema abaixo:



em que  $k_1$  representa a taxa de transformação do N-orgânico em  $\text{NH}_4^+$  mais a liberação de  $\text{NH}_4^+$  proveniente de adubação nitrogenada com sulfato de amônio; e  $k_2$  representa a taxa de formação de nitrato.



**Figura 1**– Ciclo do nitrogênio no solo.

Essas transformações são introduzidas no modelo SIMASS-C no termo fonte ou sumidouro ( $\Gamma$ ) da equação 2.23 de transporte de solutos no solo. Na

fonte ou sumidouro, são consideradas as perdas de  $\text{N-NH}_4^+$  e o acréscimo de  $\text{N-NO}_3^-$  durante o movimento de água no solo. A fonte ou sumidouro é expresso por:

$$\Gamma = -k_1C_1 + k_2C_2 \quad (3.1)$$

em que  $k_1C_1$  é a concentração de  $\text{N-NH}_4^+$  desaparecida no tempo  $t$  e profundidade  $z$ , em  $\text{g cm}^{-3} \text{ h}^{-1}$ ; e  $k_2C_2$  é a concentração de  $\text{N-NO}_3^-$  formada no mesmo intervalo de tempo  $t$  e profundidade  $z$ , em  $\text{g cm}^{-3} \text{ h}^{-1}$ .

Para cada solo e tratamento (item 3.1.1), foram ajustadas equações de regressão, considerando o efeito de temperatura e umidade na mineralização e nitrificação. Posteriormente, essas equações foram inseridas na equação de transporte de solutos, passando a representar a fonte/sumidouro, usada para simular o transporte de nitrato e amônio no perfil do solo.

Caso o íon simulado seja o nitrato, o termo  $\Gamma$  é considerado *fonte*, e o programa seleciona a função nitrificadora para o cálculo do incremento de nitrato ( $\Delta\text{NO}_3^-$ ) formado entre o tempo  $j$  e  $j+1$ , adicionando-o ao nitrato já existente no nó no tempo  $j+1$ . A escolha dos parâmetros da função nitrificadora depende do conteúdo de água (calculado utilizando-se a equação de Richards) e da temperatura do solo, conforme Figura 2. Nesse caso, o primeiro termo da equação 3.1 é zero, ou seja, o modelo proposto não simula a movimentação de nitrato e amônio, simultaneamente.

Caso o íon simulado seja o amônio, o termo  $\Gamma$  é considerado *sumidouro*, e o programa seleciona a função mineralizadora para o cálculo do incremento de amônio ( $\Delta\text{NH}_4^+$ ) perdido entre o tempo  $j$  e  $j+1$ , subtraindo-o do amônio já existente no nó  $i$  no tempo  $j+1$ . A escolha dos parâmetros da função mineralizadora também depende do conteúdo de água (calculado utilizando-se a equação de Richards) e da temperatura do solo (Figura 2). Semelhante ao descrito anteriormente, nas simulações para o íon amônio, o segundo termo da equação 3.1 é zero.

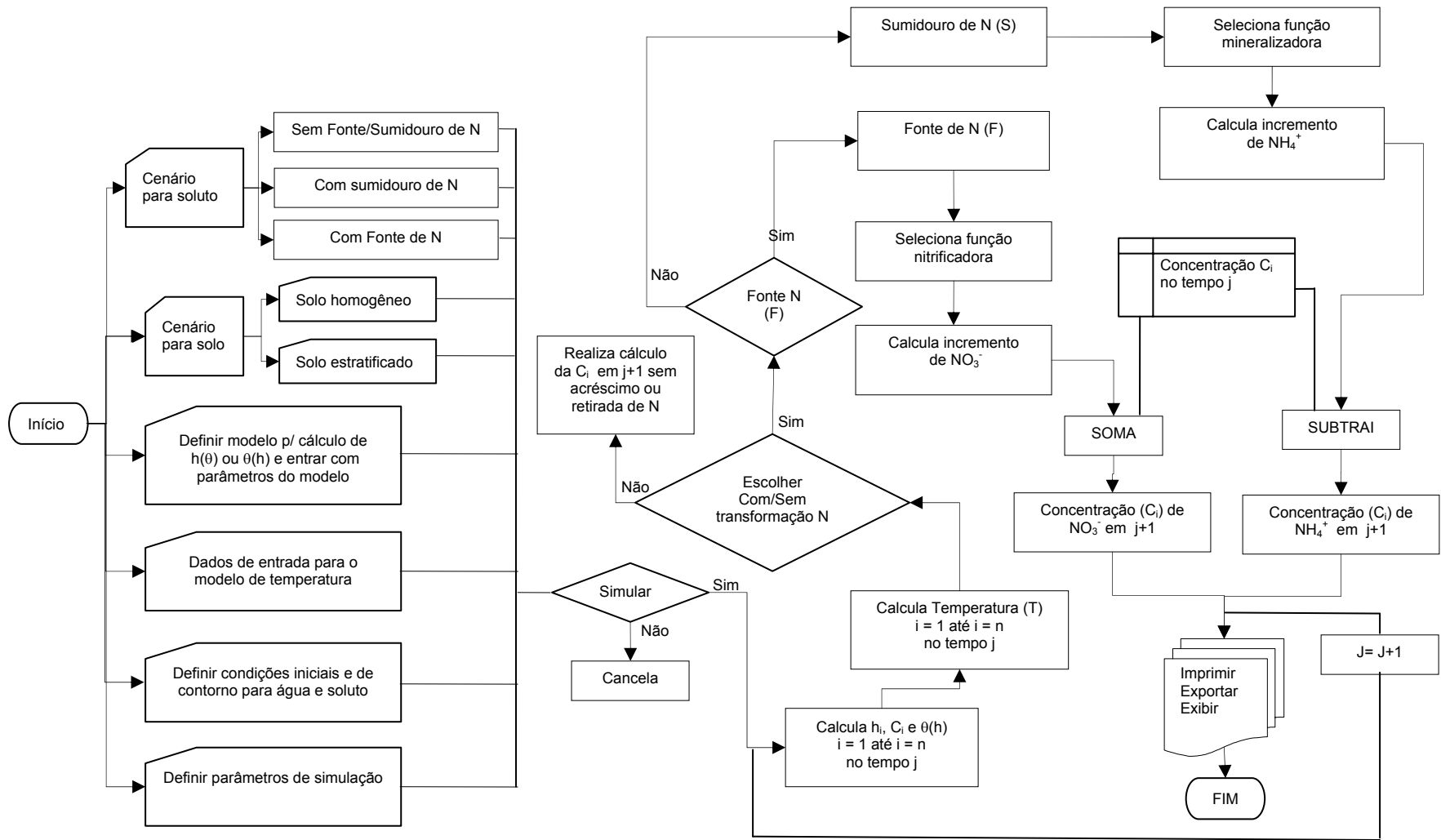


Figura 2- Fluxograma do modelo SIMASS\_C com as modificações propostas.

### 3.2. Transporte de calor no solo

Muitos processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem no solo, dentre eles os de mineralização e nitrificação, são influenciados pela temperatura.

A solução da equação de 2.28 é feita considerando as condições iniciais e de contorno, respectivamente, apresentadas pelas equações:

$$T(z,0) = T_a + (A_0 \times e^{-z/d}) \text{sen}(-z/d) \quad z \geq 0 \quad (3.2)$$

$$T(0,t) = T_a + A_0 \times \text{sen}(\omega \times t) \quad t \geq 0 \quad (3.3)$$

$$T(\infty,t) = T_a \quad t \geq 0 \quad (3.4)$$

A condição de contorno (3.3) indica que a temperatura superficial varia senoidalmente com o tempo e a condição de contorno (3.4) indica que em grandes profundidades, o solo permanece na temperatura média independentemente do tempo.

Assim, para considerar o efeito da temperatura do solo nas transformações biológicas do nitrogênio, adotou-se o modelo analítico proposto por VAN WIJK e De VRIES (1963), citados por WU e NOFZIGER (1999) e ELIAS (2004). Com a equação diferencial parcial 2.28, chega-se à equação:

$$T(z,t) = T_a + (A_0 \times e^{-z/d}) \text{sen}(\omega \times t - z/d) \quad (3.5)$$

em que:

$T(z,t)$  = temperatura média diária do solo, no tempo  $t$  e na profundidade  $z$  ( $^{\circ}\text{C}$ );

$T_a$  = temperatura média na superfície do solo, em  $^{\circ}\text{C}$ ;

$A_0$  = amplitude média diária da temperatura na superfície do solo, em  $^{\circ}\text{C}$ ;

$\omega$  = freqüência angular, em  $\text{rad h}^{-1}$ ;

- $\varphi$  = constante de fase, em radianos;  
 $d$  = caracteriza a atenuação diurna da propagação da onda de temperatura no solo, em cm.

A temperatura média diária ( $T_a$ ) e a amplitude ( $A_o$ ) podem ser calculadas com base nos valores observados de temperatura máxima e mínima:

$$T_a = (T_{\max} + T_{\min})/2 \quad (3.6)$$

$$A_o = (T_{\max} - T_{\min})/2 \quad (3.7)$$

em que:

$T_{\max}$  = temperatura máxima observada na superfície do solo, em °C;

$T_{\min}$  = temperatura mínima observada na superfície do solo, em °C;

A variável “d” na equação 3.2 caracteriza a atenuação da temperatura com a profundidade do solo. Esta variável representa o fator de amortecimento da onda de calor ou temperatura (SCHNEIDER, 1979), podendo ser calculado utilizando-se a equação:

$$d = \sqrt{2\kappa/C_h \times \omega} \quad (3.8)$$

em que  $\kappa$  é a condutividade térmica do solo, em  $\text{cal cm}^{-1} \text{h}^{-1} \text{°C}^{-1}$ ;  $C_h$  é o calor específico do solo, em  $\text{cal cm}^{-3} \text{°C}^{-1}$ ; (HILLEL, 1980) e  $\omega$  é a frequência angular, em  $\text{rad h}^{-1}$ .

A frequência angular para um período de 24 horas é dada pela equação:

$$\omega = \frac{2 \times \pi}{24} \quad (3.9)$$

As contribuições da matéria orgânica e da fração volumétrica de ar no calor específico de um solo podem ser negligenciadas quando a composição do solo é

dominada pela fração mineral (HILLEL, 1980). Assim, o calor específico do solo pode ser estimado por:

$$C_h = 2000 \times (1 - \mu) + 4200 \times \theta \quad (3.10)$$

em que  $\mu$  é a porosidade ( $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$ ) e  $\theta$  é o conteúdo de água no solo ( $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$ ).

A condutividade térmica de um solo não saturado pode ser calculada, segundo FAROUKI (1986), citado por WU e NOFZINGER (1999), por:

$$\kappa = \left[ \frac{F_s(1 - \mu) \times k_s + F_a(\mu - \theta) \times k_a + \theta \times k_w}{F_s(1 - \mu) + F_a(\mu - \theta) + \theta} \right] \quad (3.11)$$

em que  $k_s$ ,  $k_w$ ,  $k_a$  são as condutividades térmicas dos sólidos, da água e do ar do solo, respectivamente.  $F_s$  e  $F_a$  são fatores que representam a relação entre o gradiente médio de temperatura entre as partículas sólidas e a água e a relação entre o gradiente de temperatura do ar e a água do solo, sendo calculadas, respectivamente, por:

$$F_s = \frac{1}{3} \times \left[ \frac{2}{1 + 0,125 \times (k_s/k_w - 1)} + \frac{1}{1 + 0,75 \times (k_s/k_w - 1)} \right] \quad (3.12)$$

$$F_a = \frac{1}{3} \times \left[ \frac{2}{1 + g_a \times (k_a/k_w - 1)} + \frac{1}{1 + (1 - 2 \times g_a) \times (k_a/k_w - 1)} \right] \quad (3.13)$$

em que:

$$g_a = 0,333 - 0,298 \times \left( 1 - \frac{\theta}{\mu} \right) \quad (3.14)$$

A condutividade térmica da parte sólida do solo pode ser estimada, com base no conteúdo volumétrico de argila do solo, utilizando-se a apresentada por GEMANT (1950), citado por WU e NOFZINGER (1999):

$$k_s = 504,58 - 2,85 \times f_{\text{arg}} \quad (3.15)$$

em que  $k_s$  é a condutividade térmica dos sólidos do solo em  $\text{kJ m}^{-1} \text{d}^{-1} \text{K}^{-1}$  e  $f_{\text{arg}}$  é o conteúdo de argila do solo (%). Os valores 2,25 e 51,41  $\text{kJ m}^{-1} \text{d}^{-1} \text{K}^{-1}$  podem ser usados para as condutividades térmicas do ar ( $k_a$ ) e da água ( $k_w$ ) do solo, respectivamente, conforme VAN WIJK (1963), citado por PARAÍBA e PULINO (2003).

### 3.2.1. Variáveis de entrada do modelo de temperatura do solo

Para o cálculo da temperatura do solo são necessárias as seguintes variáveis de entrada:

- Temperatura máxima e mínima diária ( $T_{\text{máx}}$  e  $T_{\text{mín}}$ ), em  $^{\circ}\text{C}$ ;
- Teor de água no solo ( $\theta$ ), em  $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$ ;
- Teor de argila do solo ( $f_{\text{arg}}$ ), em %;
- Condutividade térmica do ar ( $k_a$ )  $\cong 2,25 \text{ KJ m}^{-1} \text{d}^{-1} \text{K}^{-1}$  (tabelado)
- Condutividade térmica da água ( $k_w$ )  $\cong 51,41 \text{ KJ m}^{-1} \text{d}^{-1} \text{K}^{-1}$  (tabelado)

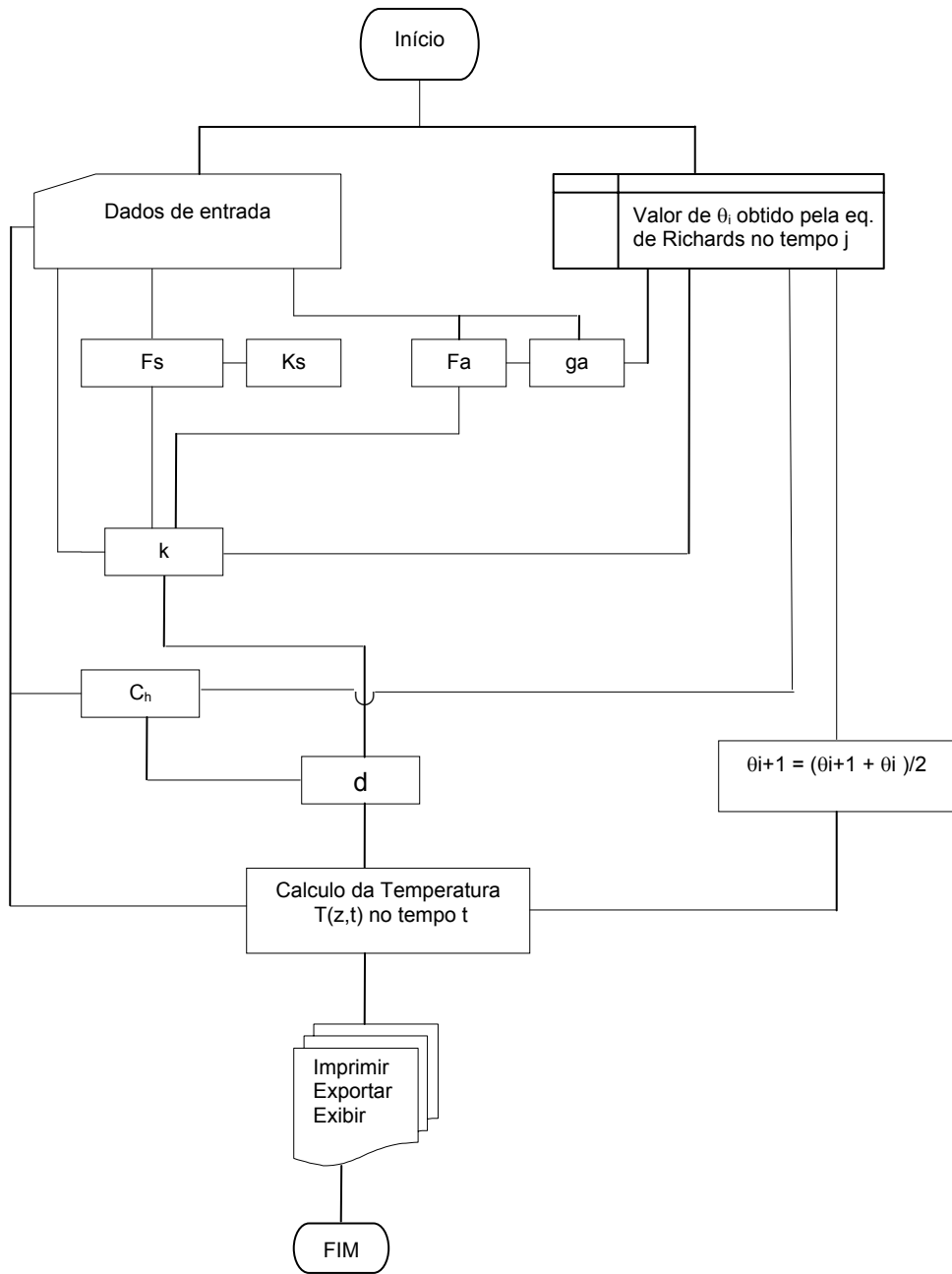
Na Figura 3 está apresentado o fluxograma resumido do programa computacional para o cálculo da temperatura do solo.

O modelo de temperatura do solo utiliza o conteúdo de água estimado com a solução da equação de Richards juntamente com as variáveis de entrada do modelo, citados acima, para o cálculo da condutividade térmica, do calor específico do solo e da difusividade térmica do solo, exibindo como saída a temperatura do solo, para um dado tempo  $t$  e profundidade  $z$ .

O modelo analítico adotado pressupõe que o teor de água deva ser constante na camada de solo analisado. No entanto, para a aplicação desse

modelo sob condições de umidade variáveis no solo, considerou-se um teor médio de água no solo.

No tempo  $j=0$ , a umidade, em cada nó  $i$ , ao longo das camadas do solo, e que será utilizada para determinação da temperatura do solo, foi calculada utilizando-se a equação:



**Figura 3-** Fluxograma do módulo de temperatura do modelo.

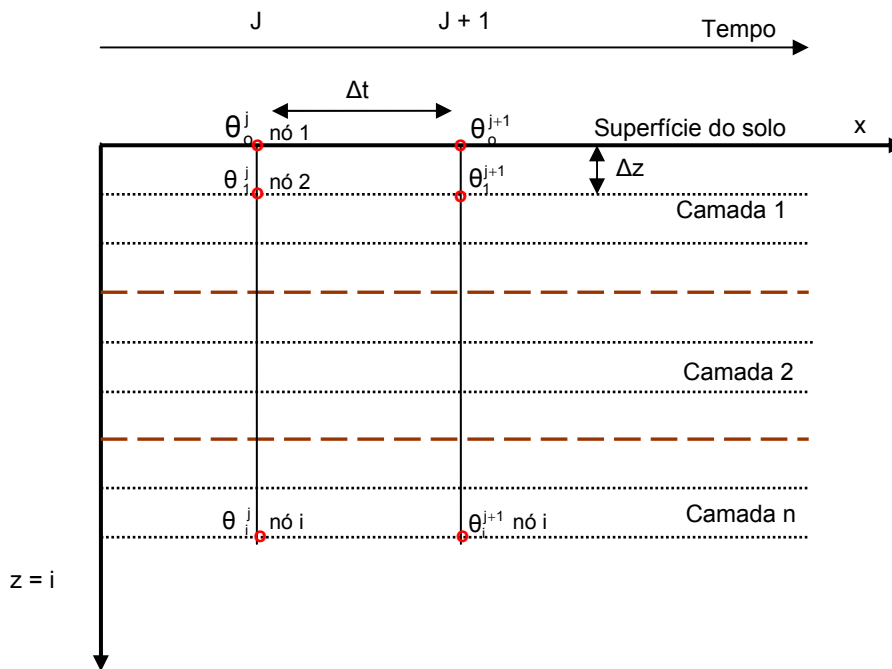
$$\bar{\theta}_{i'}^j = \left( \frac{\sum_{i=0}^{i'} \theta_{i'}^j}{i'} \right) \quad (3.16)$$

em que  $\bar{\theta}_{i'}^j$  é a umidade média na profundidade  $i$  e tempo  $j$ ; sendo  $i'$  o número parcial de nós na malha de discretização (Figura 4).

No tempo  $j+1$  é feita a média dos valores de umidade em profundidade  $e$ , posteriormente, calcula-se as temperaturas médias em cada nó  $i$ , entre os tempos  $j$  e  $j+1$ , conforme apresentada na equação:

$$\bar{\theta}_{i'}^{j+1} = \left[ \frac{(\sum_{i=0}^{i'} \theta_{i'}^j) + (\sum_{i=0}^{i'} \theta_{i'}^{j+1})}{2i'} \right] \quad (3.17)$$

No esquema abaixo (Figura 4) está apresentada uma ilustração do procedimento descrito nas equações 3.16 e 3.17.



**Figura 4** – Esquema da forma de cálculo do teor de água médio ao longo do tempo, nas camadas do solo, a ser utilizada na determinação da temperatura média do solo.

### 3.3 Pressuposições do modelo desenvolvido

O programa exibe como dados de saída a temperatura diária do solo, o potencial matricial, o conteúdo de água, o fluxo de água e a concentração de soluto no solo ao longo do tempo, bem como o incremento de nitrato e amônio formado e perdido, respectivamente, em cada intervalo de tempo.

#### a) Módulo mineralização e nitrificação

- O modelo pressupõe que não há falta de substrato, ou seja, não existe falta de nitrogênio para os microrganismos. Neste caso, a relação C:N deve ser baixa para favorecer a mineralização.
- a atividade dos microrganismos pode ser representada por uma equação de cinética de primeira ordem (modelo exponencial). Isto significa que a taxa de transformação do substrato é proporcional à concentração do substrato.
- As reações são irreversíveis, não ocorre transformação de nitrato para amônio, nem de  $\text{NH}_4^+$  para N-orgânico, isto é, não ocorre processo de redução, apenas oxidação.
- Em temperaturas acima de 50 °C ou abaixo de 5 °C não ocorre mineralização e nitrificação.
- Em situações em que o conteúdo de água no solo (base volume) for igual ou superior ao da porosidade total do solo ou inferior ao do ponto de murcha permanente, não ocorre perda de amônio nem acúmulo de nitrato e o termo  $\Gamma$  torna-se zero.
- O programa permite selecionar a opção fonte, sumidouro ou sem fonte/sumidouro, em qualquer nó  $i$ , ao longo do solo. Por exemplo, assim é possível considerar a formação (acréscimo) de nitrato em todo o perfil ou apenas na superfície do solo. De forma semelhante, pode-se simular as perdas de amônio ocorrendo em qualquer ponto ao longo do solo. Isto permite simulações que considerem, por exemplo, o nitrogênio extraído pelas raízes em cada camada de solo.

- Com o uso do modelo pode-se simular o processo de mineralização e nitrificação, para os solos estudados, para um período de 30 dias de simulação, pois os modelos de mineralização e nitrificação são empíricos e foram ajustados para esse período de tempo.

#### **b) Módulo transporte de nitrogênio no solo**

Com o modelo desenvolvido pode-se simular o movimento de água e solutos no solo, considerando a existência de várias camadas de solo, ou seja, permite simular o transporte de solutos em solo estratificado, ao contrário do modelo até então existente.

#### **c) Módulo temperatura do solo**

- O modelo considera que a distribuição da temperatura do solo, ao longo do dia, se dá segundo uma função senoidal.
- Embora o modelo de temperatura do solo adotado seja válido para solo sem vegetação, homogêneo com conteúdo de água constante. Neste trabalho, os valores de umidade do solo variam em profundidade, gerando um erro inerente a essas considerações.

### **3.4 Experimento na câmara de incubação**

Foram utilizados dois solos: Latossolo Vermelho Escuro (LV), textura argilosa, e Latossolo Vermelho Amarelo (LE), textura arenosa, conforme descrições apresentadas na Tabela 2. Ambos os solos foram coletados próximos a áreas cultivadas com café, na região de Viçosa, Minas Gerais.

As amostras foram coletadas da camada de 0 a 40 cm. Elas foram secas ao ar, passadas em peneiras com malha de 2 mm e homogeneizadas. Posteriormente, foram caracterizadas física e quimicamente (Tabela 2).

**Tabela 2.** Características físicas e químicas das amostras dos solos usados no experimento.

Característica	Solo LE (0-40 cm)	Solo LA (0-40 cm)	Solo LA (40-60 cm) *
Análise textural (dag kg <sup>-1</sup> )			
-areia grossa	20	48	51
-areia fina	9	15	13
-silte	8	6	6
-argila	63	31	30
- $\theta_{cc}$ (kg kg <sup>-1</sup> )	0,281	0,211	0,181
- $\theta_{pmp}$ (kg kg <sup>-1</sup> )	0,208	0,098	0,115
Classe textural	Muito argilosa	Franco-argilo-arenosa	Franco-argilo-arenosa
Massa específica (g cm <sup>-3</sup> ) <sup>(1)</sup>			
-do solo	1,16	1,30	1,28
-de partículas (g cm <sup>-3</sup> ) <sup>(2)</sup>	2,39	2,53	2,45
Porosidade (%)	51,50	48,61	47,80
pH			
-em água (1: 2,5)	5,88	5,02	-
- em KCl (1: 2,5)	4,61	4,31	-
P (mg dm <sup>-3</sup> )	2,1	4,2	-
P-rem (mg L <sup>-1</sup> )	22,3	32,8	-
K (mg dm <sup>-3</sup> )	845	69	-
Na (mg dm <sup>-3</sup> )	4,0	9,0	-
Ca <sup>2+</sup> (cmol <sub>c</sub> dm <sup>-3</sup> )	0,87	0,64	-
Mg <sup>2+</sup> (cmol <sub>c</sub> dm <sup>-3</sup> )	0,25	0,14	-
Al <sup>3+</sup> (cmol <sub>c</sub> dm <sup>-3</sup> )	0,00	0,80	-
H + Al (cmol <sub>c</sub> dm <sup>-3</sup> )	5,6	6,3	-
SB (cmol <sub>c</sub> dm <sup>-3</sup> )	3,30	1,00	-
t (cmol <sub>c</sub> dm <sup>-3</sup> )	3,3	1,80	-
T (cmol <sub>c</sub> dm <sup>-3</sup> )	8,9	7,30	-
V (%)	37,1	13,7	-
m (%)	0,0	44,4	-
ISNa (%)	0,53	2,17	-
MO (dag kg <sup>-1</sup> )	3,73	2,74	-
Fe (mg dm <sup>-3</sup> )	26,3	16,6	-
Mn (mg dm <sup>-3</sup> )	8,6	4,4	-

<sup>(1)</sup> Método da Proveta (Ruiz, 2003); <sup>(2)</sup> Método do balão volumétrico (EMBRAPA, 1997); Ca, Mg e Al – Extrator KCl – 1 mol L<sup>-1</sup>; H + Al – Acetato de cálcio 0,5 mol L<sup>-1</sup> – pH 7,0; SB - Soma de bases trocáveis; (t) – Capacidade de troca catiônica efetiva; (T) – Capacidade de troca catiônica a pH 7,0; V– Índice de saturação por bases; m – Índice de saturação por alumínio; ISNa – Índice de saturação de sódio; MO – método de Walkley-Black; P-rem – Fósforo remanescente; \* não foi feita análises química da camada de 40-60 cm.

Com base nos resultados da análise química do solo, foi feita calagem dos dois solos com  $\text{CaCO}_3$  cujas doses foram estimadas pelo o método de saturação por bases.

Os tratamentos consistiram de três temperaturas (15, 25 e 35 °C) três teores de água no solo (base peso) (20%, 30% e 42%) no de textura argilosa e 10%, 22% e 35%, no de textura arenosa. As amostras foram retiradas, para análise, aos 3, 7, 15, 30, 45 e 60 dias de incubação. Os dois menores valores de umidade citados equivalem, aproximadamente, às tensões de 1500 kPa (ponto de murcha) e 33 kPa (capacidade de campo), tanto para o solo argiloso quanto arenoso.

Em seguida, amostras de solo úmido, equivalentes a 40 g de solo seco, foram colocadas em recipientes plásticos de 80 mL de capacidade (Figura 5), para obter uma massa específica próxima à de campo.

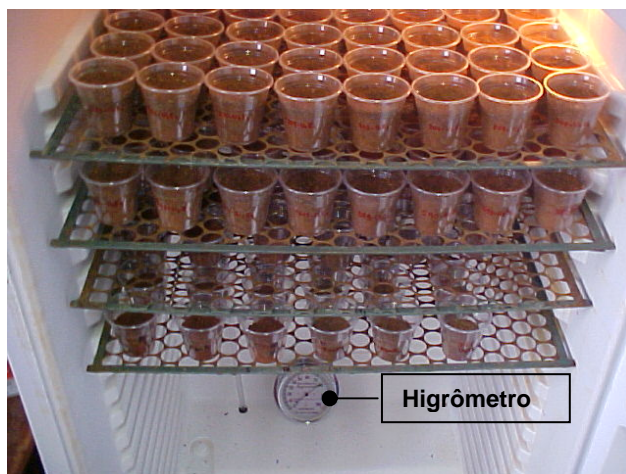
Inicialmente, os recipientes foram mantidas em laboratório por um período de 5 dias, mantendo-se o teor de água do solo em torno de 80% da capacidade de campo, por meio de aplicações periódicas de água destilada, para que ocorresse a solubilização do corretivo e fosse restabelecido o equilíbrio da comunidade microbiana dos solos.

Após esse período, a aplicação de água foi cessada, para que o solo pudesse perder umidade, permitindo assim, serem estabelecidos os tratamentos.

Antes de serem submetidos aos tratamentos, amostras dos dois solos foram coletadas com a finalidade de determinar as concentrações iniciais de nitrogênio total, carbono orgânico, amônio e nitrato. Essas análises foram realizadas no Laboratório de Fertilidade do Departamento de Solos da UFV.

As amostras de solo foram separadas em blocos, conforme os valores de teor de água a serem avaliados, acrescentando-se água destilada aos recipientes, com o auxílio de um borrifador. Os recipientes com o solo foram pesados com balança eletrônica de duas casas de precisão, até atingir a umidade definida para os tratamentos. Feito isso, foi realizada adubação nitrogenada dos solos com sulfato de amônio,  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ , produto P.A. O adubo foi aplicado como solução,

com uma concentração equivalente a  $200 \text{ mg dcm}^{-3}$  de N ( $400 \text{ kg ha}^{-1}$  de N), com auxílio de uma pipeta de 5 mL.



**Figura 5-** Vista dos recipientes contendo solo e sua disposição no interior da B.O.D.

Imediatamente após a adubação nitrogenada, os recipientes com solo foram colocados nas câmaras de incubação (B.O.D.), num total de três câmaras.

Em cada B.O.D. foi fixada uma temperatura, segundo os tratamentos propostos. Portanto, em cada B.O.D., o solo foi organizado por teor de água, período de incubação e repetição, num total de 108 recipientes com solo por B.O.D.

O teor de água no solo foi controlado mediante pesagem em balança de precisão com duas casas decimais a cada 24 horas, repondo-se o volume de água evaporado, quando necessário. Esse procedimento foi repetido até o final do experimento. Ao longo dos testes, observou-se uma variação máxima no teor de água no solo de 2 %; essa variação foi maior para os solos mais úmidos. A umidade relativa no interior da B.O.D. foi mantida entre 75% e 85%, para reduzir as perdas por evaporação do solo, o que foi conseguido com o uso de um recipiente com água, colocado na parte inferior da B.O.D. A umidade relativa no interior da B.O.D. foi medida com higrômetro (Figura 5).

O experimento foi montado segundo esquema de parcelas subsubdivididas, tendo nas parcelas 3 temperaturas, nas subparcelas um esquema fatorial  $3 \times 6$  (3

umidades e 6 períodos de incubação) em delineamento inteiramente casualizado, com 3 repetições.

Aos 3, 7, 15, 30, 45 e 60 dias de incubação, as amostras de solo contidas nos recipientes plásticos foram retiradas, homogeneizadas, acondicionadas em sacos plásticos, congeladas, para posterior análise das concentrações de  $\text{N-NH}_4^+$  e de  $\text{N-NO}_3^-$  e do pH. As concentrações de  $\text{N-NH}_4^+$  e  $\text{N-NO}_3^-$  das amostras de solo foram determinadas nos extratos de  $\text{KCl } 1 \text{ mol L}^{-1}$ , considerando o teor de água já existente nas amostras. Essa precaução foi tomada para evitar possíveis influências do teor de água das amostras e nos resultados de concentração  $\text{N-NH}_4^+$  e de  $\text{N-NO}_3^-$ .

O nitrogênio total foi analisado segundo o método de Kjeldahl, descrito por SILVA (1990), e o carbono orgânico foi determinado de acordo com o método de WALKLEY-BLACK, com modificações propostas por YEOMANS e BREMNER (1988).

A determinação da concentração de  $\text{NH}_4^+$  foi feita utilizando-se método descrito por KEMPERS e ZWEERS (1986), que se baseia na formação de um complexo de cor azul-esmeralda, e as análises de nitrato foram realizadas conforme YANG et al. (1998), fundamentada no método colorimétrico.

### **3.5 Transporte de nitrato e amônio em colunas de solo**

Para testar o modelo de transporte de nitrato e amônio proposto foi conduzido um experimento no Laboratório de Água e Solo do Departamento de Engenharia Agrícola, seguindo-se as recomendações descritas por AZEVEDO et al. (1996), com modificações.

Os solos empregados nesse experimento foram os mesmos do primeiro experimento (item 3.3.1), com inclusão do solo arenoso da camada de 40-60 cm. A finalidade era analisar o movimento de água em solo até 60 cm.

As amostras foram secas ao ar (TFSA), passadas em peneira com malha de 2 mm e, em seguida, homogeneizadas. Amostras desse solo foram usadas para determinar-lhes as características físicas tais como: curva de retenção de

água, utilizando-se o extrator de Richards; densidade do solo (método da proveta); densidade de partículas (método do balão volumétrico); e condutividade hidráulica (EMBRAPA, 1997).

No processo de montagem das colunas, definiu-se, previamente, que cada estrato de solo teria a espessura de 40 cm, exceto o solo arenoso, em que as colunas foram montadas com duas camadas de solo, 0-40 cm e 40-60 cm, procurando-se expressar melhor as condições reais de campo.

As colunas foram dispostas no delineamento em blocos casualizados na bancada de ensaio (Figura 6), constante de 4 épocas de coleta e três repetições por época, ou seja, a cada época eram desmontadas 3 colunas (para cada solo) para obter as concentrações de nitrato, de amônio e do teor de água ao longo da coluna.

Como o procedimento de amostragem para determinação do teor de água e das concentrações de  $\text{N-NH}_4^+$  e  $\text{N-NO}_3$  foi destrutivo, foi necessária a montagem de 30 colunas de solo; 12 para cada solo estudado. Em 24 colunas foram aplicados os tratamentos e as 6 restantes serviram para acompanhar a variação da temperatura do solo durante o experimento.

As unidades experimentais foram constituídas por colunas com solo, estas de tubo de PVC rígido, com diâmetro nominal de 75 mm e altura de 45 cm (solo argiloso) e 65 cm (solo arenoso), com seccionamento de 10 em 10 cm para facilitar a desmontagem e posterior coletas das amostras, em diferentes profundidades, ao final de cada época de interesse. Para vedação dos pontos de junção dos anéis e fixação das colunas, utilizou-se silicone e fita do tipo adesiva transparente (45 mm de largura), deixando-se, na extremidade superior da coluna, um anel com borda de cinco centímetros. O anel superior teve a função de contenção da água aplicada, pela irrigação.

Todas as colunas foram montadas com um tampão, com furos de  $\pm 0,3$  mm, na base inferior. No tampão, foi colado um funil plástico, com o auxílio de massa plástica, para facilitar a coleta do lixiviado. Cobrindo os furos do tampão, foi colocada uma fina camada de lã de vidro e, acima 2 cm de areia, em cima da qual foi colocado o solo. A areia foi previamente lavada com solução de ácido clorídrico

5% e, posteriormente, com água destilada para possibilitar a remoção das impurezas contidas nesse material.

Antes do enchimento das colunas, foi feita a correção do solo, semelhantemente à efetuada no solo do experimento de incubação (item 3.3.1). Apenas a camada de 40-60 cm, do solo arenoso, não foi corrigida com  $\text{CaCO}_3$ .

Para garantir um perfil uniforme nas camadas, quanto às propriedades físicas e químicas, o preenchimento das colunas com solo foi feito em camadas de aproximadamente 5 cm de espessura, exercendo-se leve pressão sobre o material com um disco de madeira e realizando-se batidas na lateral da coluna. Conseqüentemente, foi possível colocar a quantidade de solo que garantiria a massa específica do solo (Tabela 2).

Foi idealizado um sistema de irrigação que permitisse aplicar água de forma uniforme e não-pontual e, ao mesmo tempo, permitisse variar a lâmina de água. O sistema de irrigação consistiu de uma tubulação principal de PVC de  $\frac{3}{4}$ " com derivações correspondentes ao número de colunas a ser irrigadas. Essas derivações eram interligadas, por mangueira, a um gotejador. Os gotejadores foram constituídos por tampão de 50 mm e funil plástico, conforme apresentado na Figura 6. Os orifícios do gotejador foram constituídos de quatro agulhas descartáveis, com dimensões de 0,70 x 25 mm. A tubulação principal foi interligada, por mangueira e registro, a um frasco de Mariotte de 20 litros, no qual era colocada a água destilada utilizada nas irrigações. A lâmina de aplicação foi controlada pela variação da posição do Mariotte em relação à saída dos gotejadores. Tanto a tubulação principal quanto os gotejadores possuem sistema de escorva para retirar as bolhas da tubulação.

A tubulação principal foi apoiada em suporte de "metalon", que, por sua vez foi sustentado por dois pares de cavalcotes colocados nas extremidades do "metalon". Esse sistema de cavalcote foi nivelado e permitia a regulagem da altura e posição dos gotejadores em relação à seção superior da coluna (Figura 6).

Para uniformizar a umidade inicial do solo, as colunas foram umedecidas, a partir de sua base, com aplicação de água destilada. Em seguida, as extremidades superiores das colunas foram cobertas com sacos plásticos para

evitar perdas de água por evaporação nas colunas de solo, permanecendo assim até atingir a umidade desejada para início dos testes.

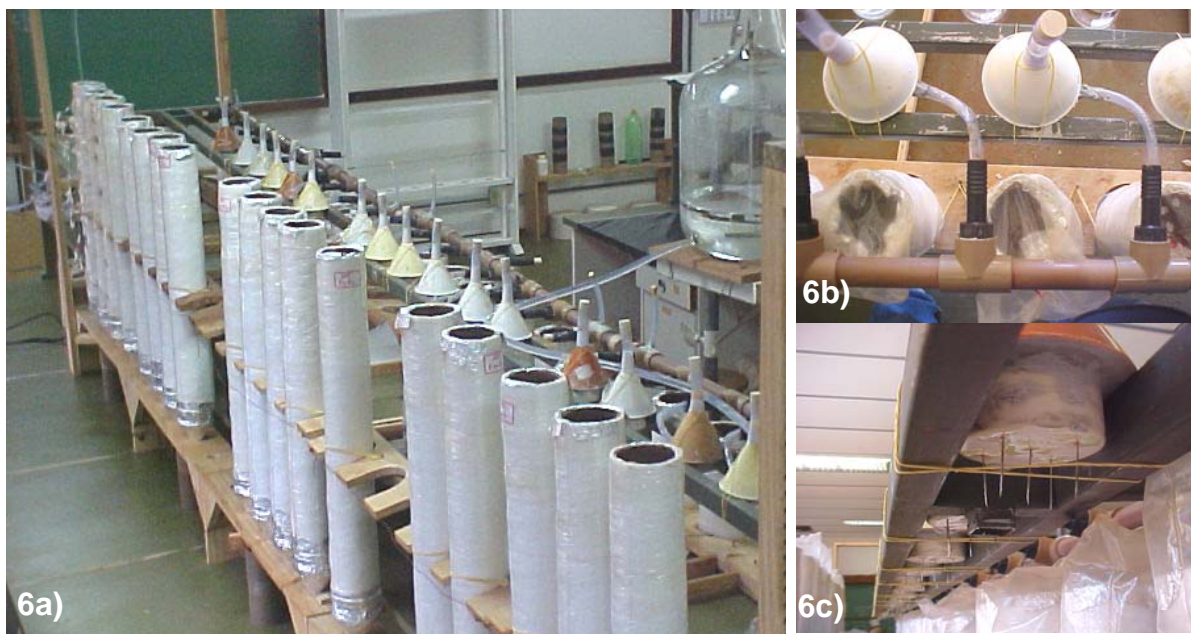
Após esse procedimento, foi aplicado, na superfície do solo de cada coluna 10 mL de solução de sulfato de amônio, na dose equivalente a  $400 \text{ kg ha}^{-1}$ , com o auxílio de uma pipeta.

Imediatamente após a aplicação do fertilizante, o que ocorreu em 3/6/04, três colunas de cada solo foram desmontadas, e amostras de solo foram retiradas nas profundidades de 0, 10, 20, 30, e 40 cm, no caso do solo argiloso, e nas de 0, 10, 15, 20, 30, 40, 50 e 60 cm, no arenoso, para obter as condições iniciais de teor de água e de concentração de  $\text{N-NH}_4^+$  e  $\text{N-NO}_3^-$ . Nas amostras retiradas, foram determinados o teor de água no solo, as concentrações de  $\text{N-NH}_4^+$  e  $\text{N-NO}_3^-$ , conforme procedimentos descritos anteriormente.

Durante o experimento foram feitas duas irrigações; a primeira realizada 7 dias após o início dos testes, ou seja, em 10/6 e a segunda realizada dez dias após a primeira, isto é, em 20/6. Antes da realização de cada irrigação foram desmontadas três colunas de para determinação da umidade e das concentrações de  $\text{N-NO}_3^-$  e  $\text{N-NH}_4^+$ . Em 30/6, dez dias após a última irrigação, foram desmontadas as três últimas colunas.

Antes de cada irrigação foi feita a calibração do sistema de irrigação. A primeira irrigação foi feita com lâmina média de 51 mm, no solo arenoso, e com 32,1 mm, no solo argiloso. Na segunda irrigação, foi aplicada lâmina média de 21 mm, no solo arenoso, e de 22,3 mm, no solo argiloso.

A determinação da evaporação ocorrida das colunas foi feito mediante pesagem em balança eletrônica com intervalos de leitura de uma casa decimal. Assim, diariamente, as colunas foram pesadas e os valores anotados. A evaporação ocorrida em cada coluna foi obtida pela diferença de pesos entre dois dias consecutivos.



**Figura 6-** Vista geral do experimento em colunas de solo (6a), do sistema de irrigação mostrado de cima (6b) e do emissor de água constituído de cinco agulhas (6c).

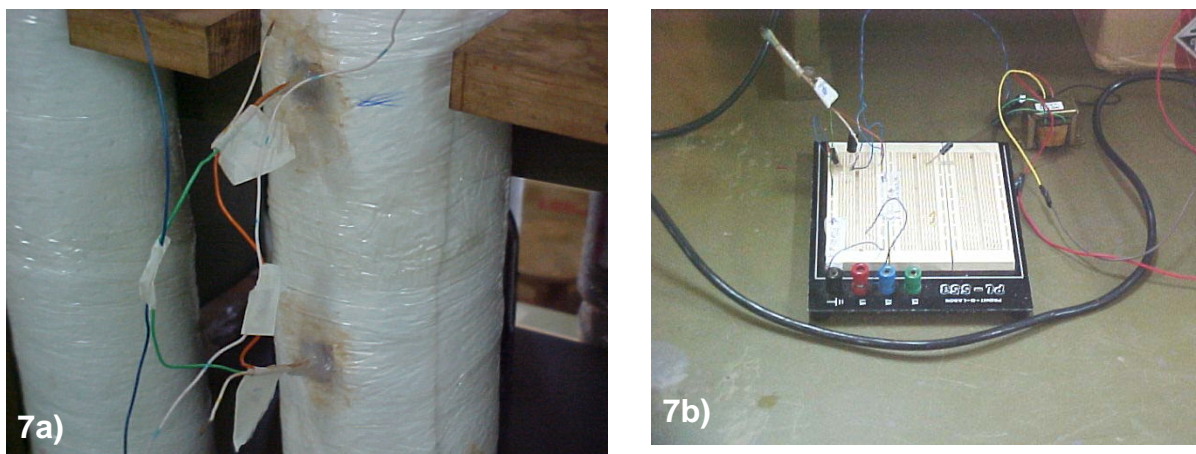
### 3.6. Sistema para aquisição dos dados de temperatura do solo

Para monitoramento da temperatura do solo, foram construídas três colunas que foram preenchidas com os solos estudados. Como a finalidade dessas colunas era determinar a temperatura do solo nos tratamentos aplicados, elas foram submetidas aos mesmos tratamentos das colunas usadas para a determinação da umidade e das concentrações de  $\text{N-NO}_3^-$  e  $\text{N-NH}_4^+$ .

Para a confecção das colunas e visando reduzir as trocas de calor entre o solo e o ambiente externo à coluna, as colunas foram envolvidas por folha de papel alumínio e folha de isopor com espessura de 5 mm. O isopor foi fixado às colunas com fita adesiva plástica transparente (Figura 7).

A temperatura foi medida a 0, 5, 10, 20, 30 e 40 cm de profundidade, no caso de solo argiloso, e a 0, 5, 10, 20, 30, 40, 50 e 60 cm, no do solo arenoso, ao longo da coluna de PVC, conforme recomendações de WIERENGA e WIT (1970). Para isso, foram inseridos lateralmente na coluna sensores de temperatura do tipo

LM35, modelo DZ, calibrado de fábrica, que permite leituras entre 5 e 55 °C.



**Figura 7-** Vista dos sensores instalados na coluna de PVC (7a) e do sistema de aquisição de dados de temperatura do solo (7b).

Foi montado um sistema de aquisição de dados (Figura 7) que permitiu a conversão da leitura em Volts, dada pelo sensor LM 35, diretamente no valor de temperatura em °C. As leituras foram feitas diretamente com o auxílio de um multímetro digital, e em intervalos de aproximadamente 4 horas, entre as 6h da manhã e 24 horas, exceto em 10/6, 20/6 e 30/6, quando as temperaturas foram lidas de hora em hora, durante o dia.

### **3.7. Obtenção dos parâmetros de transporte de $\text{NO}_3^-$ e $\text{NH}_4^+$**

Para obtenção dos parâmetros de transporte do nitrato e amônio, ou seja, o fator de retardamento (R) e o coeficiente dispersivo-difusivo (D), foram confeccionadas, com tubos de PVC de 4,75 cm de diâmetro interno e 20 cm de altura, colunas preenchidas com solo (TFSA) até uma altura de 15 cm. As colunas foram saturadas de baixo para cima por um período de 24 horas. Antes de iniciar os testes foi passado o equivalente a 1,0 volumes de poros de água destilada para garantir a retirada de ar dos poros. Imediatamente após isso ter sido feito, uma solução de nitrato de amônio (com concentração equivalente a  $400 \text{ kg ha}^{-1}$ ) foi aplicada na extremidade superior da coluna, sendo coletado o volume percolado ao longo do tempo, para determinação dos parâmetros de transporte do nitrato e

amônio. A descrição detalhada dos procedimentos para determinação dos parâmetros de transporte estão descritas em OLIVEIRA (2001).

Utilizou-se o programa computacional DISP v. 1.1, desenvolvido por BORGES JR e FERREIRA (2004), não publicado, para calcular os parâmetros de transporte. Dentre as opções apresentadas pelo DISP, foi usado o “modelo A1” que trabalha com a concentração do soluto no efluente ou percolado. Os dados de número de volumes de poros ( $n_p$ ), concentração relativa do soluto ( $c$ ), teor de água no solo, densidade do solo, fluxo e comprimento da coluna de solo constituíram as variáveis de entrada do programa para o cálculo do coeficiente de dispersão-difusão e do fator de retardamento. O programa DISP ajusta o modelo matemático de deslocamento de fluidos miscíveis aos dados experimentais por meio da soma dos mínimos quadrados dos resíduos.

Utilizou-se o software SWRC (Soil Water Retention Curve) v. 3.0, desenvolvido por DOURADO NETO et al. (2000) para ajuste do modelo de Van GENHUTCHEN (1980).

O coeficiente de difusão em água pura utilizado para o nitrato foi de  $0,00114 \text{ cm}^2 \text{ min}^{-1}$ , e de  $0,001176 \text{ cm}^2 \text{ min}^{-1}$ , para o amônio (KEMPER, 1986).

No cálculo do coeficiente de dispersão hidrodinâmica, tanto para o nitrato como para o amônio, o fator de tortuosidade “ $\tau$ ” e a constante “ $n^*$ ” foram considerados iguais a 1.

### **3.8. Critério de avaliação dos modelos**

Os modelos ajustados de mineralização e nitrificação líquidas, bem como o modelo SIMASS-C modificado, foram avaliados segundo os seguintes critérios estatísticos: coeficiente de determinação ( $R^2$ ), raiz quadrada do erro médio (RQMR), coeficiente residual de massa (CRM), eficiência do modelo (EF) e erro máximo (ER), conforme LOAGUE e GREEN (1991), XEVI et al. (1996) e ZACHARIAS et al. (1996). Esses critérios estatísticos permitem comparar os resultados simulados com os observados experimentalmente, avaliando o desempenho do modelo por meio da análise do erro residual.

A raiz quadrada do erro médio é sempre maior ou igual a zero, e o valor ótimo igual a zero. Essa medida mostra o erro obtido na estimativa de  $y_i$ , sendo calculada, usando-se a seguinte expressão:

$$\text{RQMR} = \left[ \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 / n_o \right]^{1/2} \quad (3.18)$$

em que  $y_i$  são os valores observados experimentalmente,  $\hat{y}_i$  são os valores simulados (preditos) e  $n_o$  é o número de observações.

O Coeficiente Residual de Massa (CRM) é menor ou igual a 1, com o valor zero indicando a condição ótima. O CRM representa a medida da tendência do modelo em superestimar ou subestimar os valores observados. Valores positivos indicam tendência à superestimação pelo modelo. A expressão matemática que descreve essa medida é:

$$\text{CRM} = \left[ \left( \sum_{i=1}^n \hat{y}_i - \sum_{i=1}^n y_i \right) / \sum_{i=1}^n y_i \right] \quad (3.19)$$

O Erro Máximo (ER) apresenta valor maior ou igual a zero, sendo o valor ótimo igual a zero. O erro máximo é dado por:

$$\text{ER} = \text{Max} |\hat{y}_i - y_i|_{i=1}^n \quad (3.20)$$

A Eficiência do Modelo (EF) apresenta ajuste perfeito quando EF é igual 1, situação em que os valores observados e simulados são iguais. Valores de EF negativo indicam que a média observada permite uma melhor estimativa do que a média simulada pelo modelo. Esse critério é representado pela expressão:

$$\text{EF} = \left[ \left( \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2 \right) / \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \right] \quad (3.21)$$

em que  $\bar{y}$  é a média dos valores observados.

## **4. Resultados e Discussão**

Na apresentação dos resultados, optou-se por seguir uma ordem de discussão conforme a ordem de execução do trabalho, dando-se ênfase inicialmente à apresentação das modificações incorporadas ao modelo SIMASS\_C e, em seguida, discutir as reações biológicas do nitrogênio, ocorridas no experimento de incubação, e que permitiram ajustar as equações de regressão (para mineralização e nitrificação) inseridas no SIMASS\_C. Na seqüência, serão discutidos os processos de transporte de água e soluto no solo e, por último, o processo de transporte de calor no solo.

Os resultados simulados pelo modelo SIMASS\_C modificado serão abordados em relação a sua validação, comparando-se os valores simulados de teor de água do solo e as concentrações de nitrato e amônio simulados com os valores medidos nos respectivos anéis das colunas segmentadas. Por fim, serão comparados os resultados de temperatura do solo obtidos experimentalmente com os simulados pelo modelo proposto.

### **4.1- Apresentação das modificações inseridas no modelo SIMASS\_C**

O modelo SIMASS\_C foi estruturado em módulos para facilitar a sua utilização pelo usuário. No menu da tela principal (Figura 8) estão apresentados os seguintes módulos: Arquivo, Clima, Cultura, Solo, Produto Químico, Limites, Simulação e Ajuda.

Dentre as modificações incorporadas ao SIMASS\_C, cita-se a possibilidade de simular o transporte de água em solos estratificados, tornando o modelo mais flexível, visto que normalmente os solos apresentam camadas estratificados. Assim, ao clicar no menu **solo** é apresentada uma tela para definição da profundidade e  $\Delta z$  de simulação. Na seqüência, o programa exibe uma tabela com a opção para entrar com os valores das variáveis físico-hídricas do solo para cada nó ao longo do perfil. Ao clicar em qualquer célula dessa tabela (Figura 8), o programa exibe outra tela (Figura 9) onde se digita os dados de entrada. Caso o solo seja homogêneo, basta repetir os parâmetros digitados no 1º nó por meio do botão **repetir última camada** até preencher os campos correspondentes aos nós existentes. Caso contrário, se o solo for estratificado, digita-se os valores das variáveis físico-hídricas de cada camada de solo, sendo possível também utilizar o botão **repetir dados** para preencher os campos dos nós que têm mesmo valor. Na Figura 8 está mostrado um exemplo dessa tabela com os campos referente a cada nó da camada preenchido. Os dados dessa tabela são referentes aos valores das variáveis da curva de retenção do solo, condutividade hidráulica, porosidade do solo e teor de argila. Estas duas últimas variáveis são usadas para o cálculo da temperatura do solo

Na tela, onde se entra com os valores das variáveis físico-hídricas, existe também a opção de selecionar *fonte* ou *sumidouro* de soluto em cada nó existente no perfil do solo (Figura 9). Havendo *fonte*, o modelo utiliza as funções nitrificadoras, e havendo *sumidouro*, o modelo busca as funções mineralizadoras, com a qual se pode calcular o incremento de soluto, formado ou perdido, respectivamente, para cada intervalo de tempo. No menu solo também existe a opção de entrar com os valores das variáveis de entrada para o cálculo da temperatura do solo.

Como resultado, o modelo exibe em tabelas (Figura 10), ou em gráficos, potencial matricial, o teor de água, concentração de soluto e a temperatura do solo ao longo do tempo. Para isso, basta clicar o ícone, existente na Figura 10, referente à variável desejada. Existe ainda a opção de exportar os dados da tabela para uma planilha do Excel.

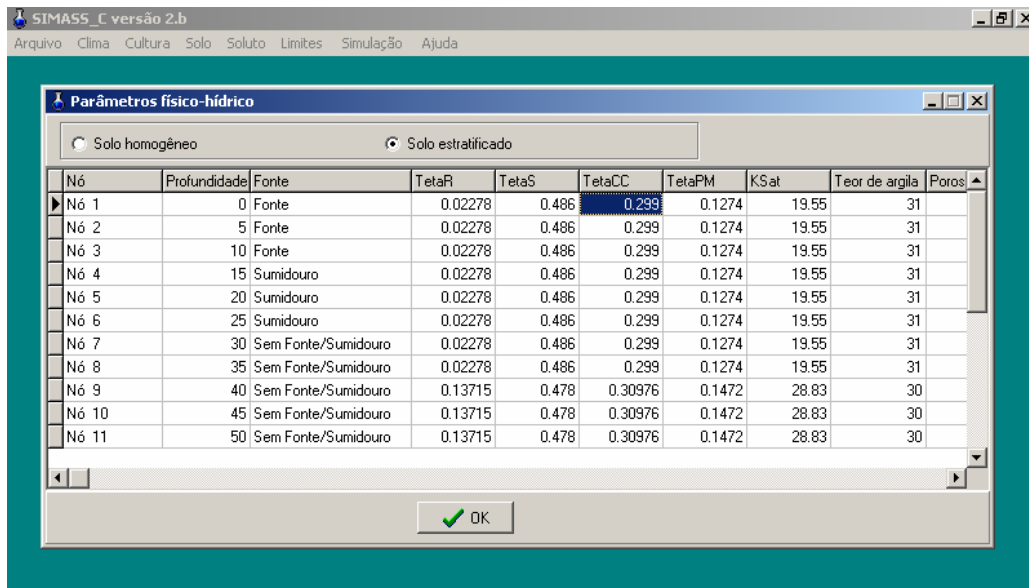


Figura 8- Tela do menu “Solo” com os parâmetros físico-hídricos do solo inseridos.

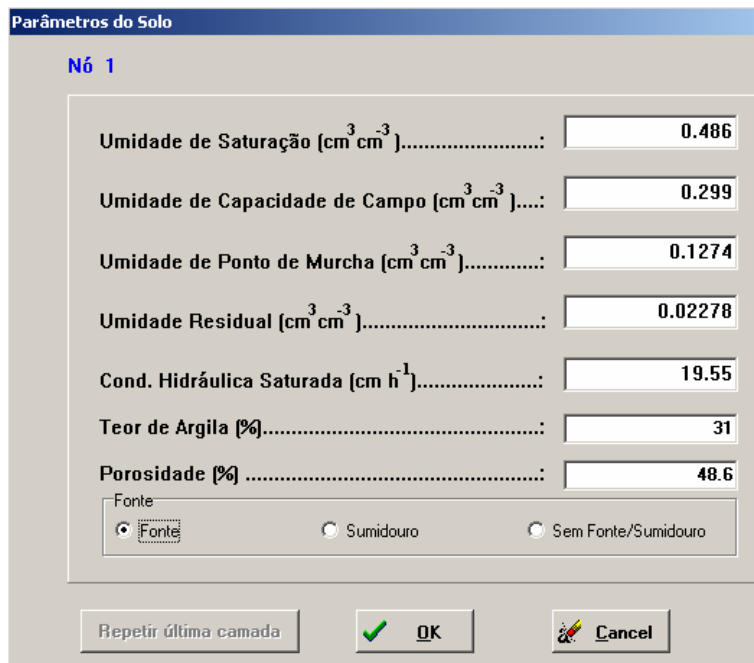
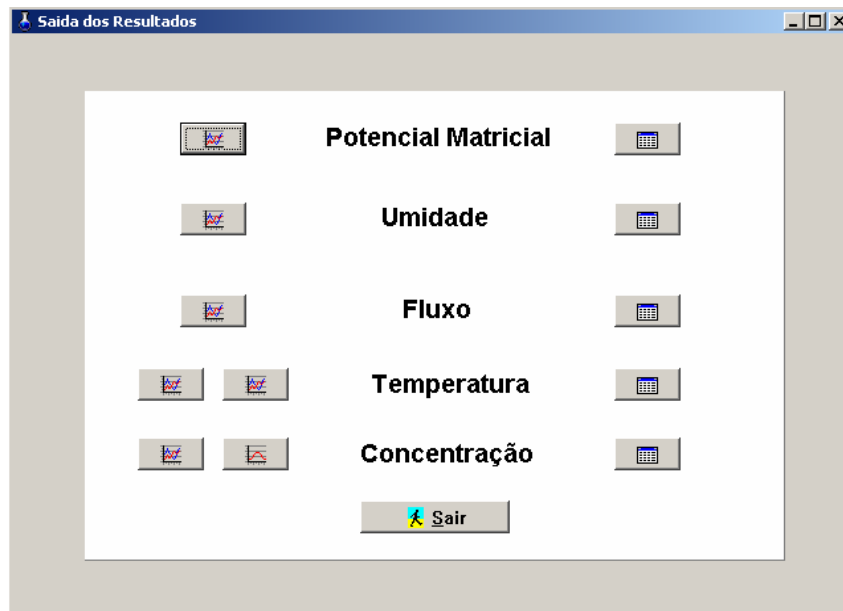


Figura 9- Tela do menu “Solo” para entrada dos valores das variáveis físico-hídricas do solo.



**Figura 10-** Tela com a exibição dos dados de saída do modelo.

#### **4.2- Mineralização da matéria orgânica e nitrificação do amônio**

Os resultados do experimento para analisar os efeitos da temperatura e do teor de água do solo nos processos de mineralização do N orgânico/dissolução do sulfato de amônio e nitrificação do amônio, obtidos ao final de seis períodos de incubação (3, 7, 15, 30, 45 e 60 dias de incubação), de dois de solo, estão apresentados nas Tabelas 3 e 4.

Devido à adubação nitrogenada com sulfato de amônio, não foi possível distinguir a mineralização da matéria orgânica da dissolução do amônio proveniente da adubação. É esperado que pequena parte do amônio formado ao longo do tempo seja proveniente da matéria orgânica do solo, e a maior parte proveniente da dissolução do sulfato de amônio.

Independentemente do solo e da temperatura, as maiores reduções na concentração de  $N-NH_4^+$  ocorreram quando o teor de água no solo foi equivalente ao da capacidade de campo (29% no solo argiloso e 22% no solo arenoso) ou superior. Para um mesmo teor de água, independentemente do solo, as

temperaturas de 25 °C a 35 °C propiciaram as maiores reduções na concentração de N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup>. FORNASIERI FILHO e FORNASIERI (1993), citados por GOMES et al. (1998), observaram que, ao aplicar sulfato de amônio em condição aeróbias no solo, o amônio foi totalmente transformado para a forma nítrica após 20 a 30 dias da sua aplicação, período de tempo inferior ao observado neste experimento.

**Tabela 3-** Concentração de N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup> e N-NO<sub>3</sub><sup>-</sup> e pH, do solo argiloso em seis períodos de incubação em função da temperatura e teor de água do solo.

Tratamentos		Períodos de incubação (dias)					
Temperatura	Teor de água	3	7	15	30	45	60
(°C)	Em (kg kg <sup>-1</sup> )	Concentração de N-NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> (mg kg <sup>-1</sup> ) *					
15	20	215,37	172,91	165,80	173,49	253,18	227,25
	29	205,06	176,58	83,16	47,58	73,62	110,27
	42	175,33	179,85	155,99	155,83	118,26	3,59
25	20	181,00	168,96	176,50	152,04	240,57	188,70
	29	211,02	154,54	154,66	26,08	1,99	1,73
	42	203,91	136,84	90,17	21,27	5,99	1,81
35	20	168,11	171,86	149,01	147,06	152,80	144,20
	29	201,50	155,60	85,93	5,00	1,46	0,66
	42	169,75	165,13	75,83	12,51	1,90	0,93
		Concentração de N-NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> (mg kg <sup>-1</sup> ) *					
15	20	31,22	32,02	29,05	43,31	53,41	58,29
	29	35,37	31,16	29,85	46,78	107,40	191,68
	42	32,58	30,47	32,27	43,56	171,70	42,65
25	20	32,27	31,96	38,41	59,31	72,82	90,33
	29	34,57	36,12	60,30	346,53	36,83	45,03
	42	29,30	29,48	43,93	260,49	34,19	42,70
35	20	34,63	33,64	84,29	124,27	122,74	131,88
	29	34,82	44,18	209,85	383,39	41,85	45,40
	42	18,69	31,96	188,70	325,98	165,42	44,45
		Valores de pH (em H <sub>2</sub> O) *					
15	20	5,19	5,33	5,11	5,35	5,15	5,15
	29	5,14	5,40	5,45	5,50	5,10	5,09
	42	5,20	5,46	5,13	4,91	4,91	4,94
25	20	5,28	5,38	5,10	5,11	4,74	5,70
	29	5,30	5,48	5,06	4,76	4,83	4,67
	42	5,32	5,38	5,05	4,66	4,67	4,71
35	20	5,33	5,46	5,12	4,92	4,94	5,51
	29	5,32	5,26	4,90	4,56	4,66	4,64
	42	5,35	5,30	4,92	4,65	4,84	4,65

\* Dados provenientes de 3 repetições.

A redução na concentração do N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, nos primeiros 30 dias de incubação, variou de 19% (na menor temperatura e teor de água) a 93% (na maior temperatura e teor de água), para o solo argiloso, enquanto no solo arenoso essas

reduções foram de 28% (na menor temperatura e umidade) e 34% (na maior temperatura e teor de água), respectivamente. Essa redução na concentração foi ainda mais acentuada se for considerado todo o período de incubação, ou seja, 60 dias. Isto ocorreu porque o  $\text{N-NH}_4^+$  proveniente da matéria orgânica e da dissolução do sulfato de amônio no solo foi convertido a nitrato, e a energia liberada na reação utilizada como fonte de energia para o crescimento dos microrganismos nitrificantes.

**Tabela 4-** Concentração de  $\text{N-NH}_4^+$  e  $\text{N-NO}_3^-$  e pH, do solo arenoso em seis períodos de incubação em função da temperatura e teor de água do solo.

Tratamentos		Períodos de incubação (dias)					
Temperatura	Teor de água	3	7	15	30	45	60
(°C)	(kg kg <sup>-1</sup> )	.....Concentração de $\text{N-NH}_4^+$ (mg kg <sup>-1</sup> )*.....					
15	10	319,48	288,59	244,71	230,18	263,52	218,30
	22	324,58	274,83	243,65	221,90	245,81	155,75
	35	290,51	286,95	211,57	199,87	207,38	153,17
25	10	326,79	287,43	227,41	249,71	217,48	183,55
	22	257,12	286,57	219,69	93,53	8,65	3,32
	35	278,10	264,53	178,98	134,05	52,09	0,02
35	10	300,23	326,60	222,24	231,24	113,52	194,03
	22	278,10	299,08	217,38	82,76	2,17	3,86
	35	244,90	292,15	187,84	162,05	67,63	22,87
		.....Concentração de $\text{N-NO}_3^-$ (mg kg <sup>-1</sup> ) *.....					
15	10	19,06	17,02	17,76	21,23	36,07	35,27
	22	20,86	15,72	16,96	24,40	65,77	73,72
	35	11,46	11,25	12,27	15,35	30,13	41,53
25	10	24,52	18,88	22,23	35,31	76,96	73,46
	22	22,10	19,06	34,01	127,64	37,32	39,69
	35	5,48	5,98	7,10	12,96	133,92	199,00
35	10	18,01	20,18	27,75	43,68	131,22	123,90
	22	20,49	21,54	32,02	197,54	37,32	37,03
	35	10,13	7,16	7,34	45,67	90,75	100,85
		.....Valores de pH (em H <sub>2</sub> O) *.....					
15	10	5,07	5,28	5,56	5,41	5,17	6,04
	22	5,40	5,33	5,36	5,33	5,03	5,78
	35	5,25	5,40	5,44	5,27	5,09	5,92
25	10	5,38	5,15	5,37	5,36	4,99	5,57
	22	5,44	5,24	5,41	4,73	4,50	4,34
	35	5,29	5,34	5,41	5,16	4,81	4,62
35	10	5,31	5,35	5,34	5,37	5,08	5,38
	22	5,26	5,22	5,27	4,66	4,49	4,35
	35	5,33	5,19	5,44	5,21	4,92	4,60

\* Dados provenientes de 3 repetições.

Segundo SIERRA (1997), as condições mais favoráveis à nitrificação ocorrem em solo na capacidade de campo (33 kPa) e temperatura em torno de 25-30°C. Nos dois solos, esse fato somente foi constatado a partir de 30 dias de incubação, ocasião em que a temperatura de 25°C propiciou maiores reduções na concentração N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup> em relação à temperatura de 35 °C.

Nos tratamentos com temperatura de 25 ou de 35 °C e o teor de água no solo se encontrava à capacidade de campo, o N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup> praticamente desapareceu aos 60 dias de incubação (Tabelas 3 e 4). Entretanto, na maior parte dos tratamentos havia amônio no solo aos 60 dias de experimento, principalmente quando a temperatura ou a umidade era baixa. NOGUEIRA et al. (1998) relataram que a duração média da nitrificação na temperatura de 25 °C e no teor de água equivalente à capacidade de campo foi de duas semanas.

No solo argiloso, nos dois últimos períodos de incubação e estando o solo com a umidade no ponto de murcha, houve predominância da mineralização líquida sobre a nitrificação líquida, nas temperaturas de 15 °C e de 25 °C, haja vista que houve aumento na concentração de N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup> em relação ao início da incubação, fato este não observado no solo arenoso.

Independentemente da temperatura e do solo, houve pequena redução na concentração de N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup> no solo com teor de água equivalente ao ponto de murcha, havendo ligeira nitrificação do NH<sub>4</sub><sup>+</sup>. Nessas circunstâncias, a atividade dos microrganismos é reduzida, devido à falta de água e à sua baixa mobilidade, o que restringe o acesso dos microrganismos aos nutrientes necessários ao metabolismo. Isso mostra que tanto o teor de água quanto a temperatura do solo afetam a nitrificação.

Nas temperaturas de 35 °C e o baixo teor de água no solo (ponto de murcha) pode ter ocorrido grande aumento no consumo de O<sub>2</sub>, devido à respiração dos microrganismos, causando anoxia temporária no solo e redução na atividade dos microrganismos nitrificantes. SIERRA (1997) e GONÇALVES e CARLYLE (1994), em condições semelhantes, observaram grande redução na nitrificação. Em solos tropicais, INDIES et al. (2000) afirmaram que a inibição da nitrificação pode ser atribuída às elevadas temperaturas e aos baixos teores de

água na camada superficial do solo, associados aos abruptos e constantes ciclos de molhamento e secagem nesta camada.

A concentração de  $\text{N-NO}_3^-$  (acúmulo de  $\text{N-NO}_3^-$ ), nos primeiros 30 dias de incubação, aumentou de 11,4% (na menor temperatura e umidade) até 50,8% (na maior temperatura e umidade), no solo arenoso, e de 38% para 1644%, no solo argiloso, respectivamente (Tabela 3 e 4). Semelhantemente ao observado para o  $\text{N-NH}_4^+$ , nas temperaturas de 25 °C e 35 °C e com o solo na capacidade de campo ou superior, houve maior acúmulo de  $\text{N-NO}_3^-$ , mostrando que o regime de umidade do solo afetam a atividade dos microrganismos, pois os mesmos necessitam de água para a absorção de nutrientes e para a manutenção do metabolismo celular.

Apesar do grande aumento do  $\text{N-NO}_3^-$  ao longo do tempo, relação ao período inicial de incubação, o seu acúmulo em termos absolutos foi pequeno (Tabela 3 e 4), ou seja, embora tenha ocorrido rápido desaparecimento do  $\text{N-NH}_4^+$  com o tempo, apenas pequena parte dele converteu-se em  $\text{N-NO}_3^-$ . Esse fato deixa evidente que a concentração de amônio desaparecido do sistema foi muito maior do que o nitrato formado. Provavelmente, parte do  $\text{N-NH}_4^+$  tenha sido imobilizado pelos microrganismos e/ou adsorvido aos colóides do solo.

Além da imobilização, a alta dose de  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$ , de 400 kg ha<sup>-1</sup> de N, elevou as taxas de nitrificação, mas também rápida redução do pH do solo, em um primeiro momento. Em seguida, a segunda etapa da nitrificação, realizadas pelas bactérias do gênero *Nitrobacter Nitrospira, nitrococcus*, foi inibida. Isso porque em meio ácido os microrganismos que oxidam o nitrito são inibidos (MOREIRA e SIQUEIRA, 2002). De acordo com MISRA et al. (1974c), a reação de nitrificação também libera  $\text{NH}_3$  (amônia), que é tóxica às nitrobactérias.

Nos tratamentos com teor de água no solo na capacidade de campo ou superior, a baixa nitrificação pode ser atribuída também à desnitrificação, visto que esse processo não ocorre apenas em condições de anoxia do solo (STRONG e FILLERY, 2002). Na verdade, mesmo em condições de não-saturação existem no solo microsítios em que não existe suprimento de  $\text{O}_2$  suficiente e o  $\text{NO}_3^-$  é usado como acceptor de elétrons. Este fato explica a baixa concentração de amônio, em

relação ao nitrato formado, nos tratamentos com teor de água no solo correspondente à capacidade de campo ou superior, e temperatura igual ou superior a 25 °C. Nos tratamentos com maior teor de água no solo, verificou-se que os solos arenoso e argiloso apresentavam 93,6% e 94,6% do espaço poroso preenchido com água, respectivamente. Ou seja, havia baixa concentração de oxigênio nesses solos. STRONG e FILLERY (2002), observaram que com 74% do espaço poroso do solo preenchido com água, a desnitrificação aumentou rapidamente.

Na temperatura de 15 °C, a atividade dos microrganismos autotróficos foi reduzida e houve maior concentração de  $\text{N-NH}_4^+$  no solo, independentemente do teor de água e do solo (Tabelas 3 e 4). Comparando-se os dois solos, na temperatura de 15 °C e na umidade no ponto de murcha, o efeito da temperatura foi mais acentuado no arenoso, pois nele as concentrações de  $\text{N-NH}_4^+$  foram maiores (exceto no último período de incubação) provavelmente porque a aeração foi maior, causando efeito direto na atividade dos microrganismos.

Nos tratamentos em que o teor de água correspondeu ao ponto de murcha permanente (1500 kPa), houve formação de  $\text{N-NO}_3^-$ , embora tenha sido baixa. Isto ocorre porque o baixo teor de água limita a difusão e, conseqüentemente, o suprimento de substrato para os microrganismos. Os efeitos fisiológicos adversos associados com a hidratação celular também podem explicar a redução da atividade dos microrganismos nitrificadores (STARK e FIRESTONE, 1995). SIERRA (2002) também observou que a mineralização não cessou na umidade equivalente ao ponto de murcha permanente (1500 kPa).

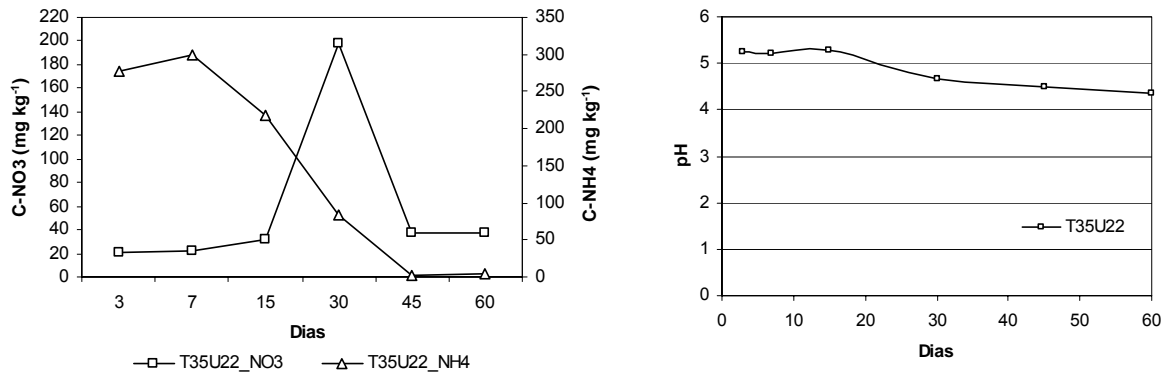
Nos menores teores de água, os solos argiloso e arenoso, respectivamente, apresentavam 45,5% e 26,7% do espaço poroso preenchido com água. Os maiores teores de água do solo argiloso explica, em parte, a maior quantidade de nitrato formado nesse solo em relação ao solo arenoso (Tabelas 3 e 4).

STRONG e FILLERY (2002) afirmaram que, em solos muito argilosos, nos quais os caminhos tortuosos do meio poroso tendem a dificultar ainda mais a difusão de  $\text{O}_2$ , necessário aos microrganismos autotróficos, ocorre menor formação de nitrato. No entanto, nos dois solos analisados, o comportamento foi

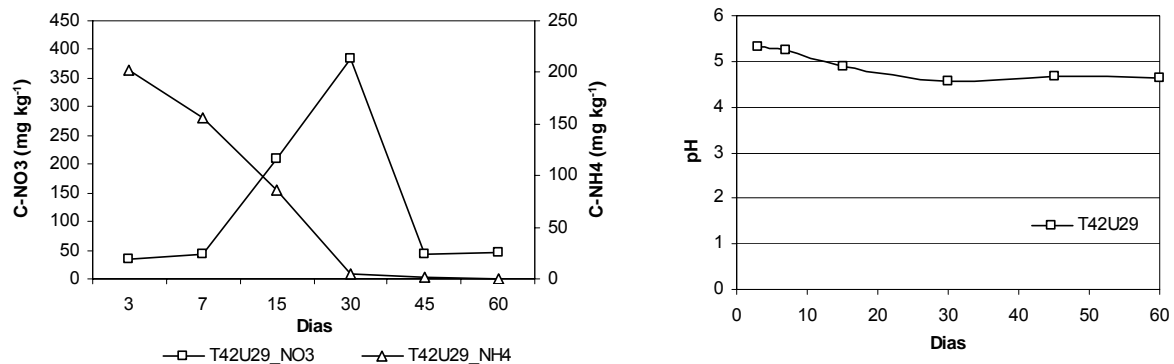
inverso, ou seja, no solo argiloso houve maior formação de nitrato em relação ao arenoso. Visto que a relação C/N dos dois solos foram semelhantes (em média de 12,6, no solo argiloso, e de 8,1, no solo arenoso, entre o início e fim do experimento), esse fato pode ser explicado pelo maior número de microporos existentes no solo argiloso, que propicia a existência de maior número de microsítios aerados e, por conseguinte, a comunidade microbiana nesses solos tende a ser maior e mais diversificada. Além disso, o solo argiloso apresenta mais íons no complexo de troca, evidenciado pela maior CTC efetiva (Tabela 2), ou seja, nele há mais nutrientes para os microrganismos responsáveis pelo processo de mineralização e nitrificação.

Como conseqüência da nitrificação, verificou-se tendência de decréscimo no pH ao longo do período de incubação, o qual se mostrou mais evidente naqueles tratamentos submetidos a temperaturas de 25 °C e de 35 °C e com o solo na capacidade de campo ou superior. O pH variou de 4,34 a 5,92 no solo arenoso, e de 4,64 a 5,70 no solo argiloso (Tabelas 3 e 4).

Apesar do comportamento geral decrescente da concentração de  $N-NH_4^+$  e crescente de  $N-NO_3^-$ , ao longo do tempo (Tabelas 3 e 4 e Figuras 11 e 12) nos tratamentos T25U22 (temperatura de 25 °C e teor de água de 22%) e T35U22, no solo arenoso, e nos tratamentos T25U42, T25U29, T15U42, T35U42 e T35U29, no solo argiloso, houve decréscimo abrupto da concentração de  $N-NO_3^-$  após 30 dias de incubação, coincidindo com o período em que a concentração de  $N-NH_4^+$  estava baixa no solo. Neste caso, acredita-se que a falta de substrato (fonte de N) tenha causado redução da nitrificação. Pode ter ocorrido, também, desnitrificação e/ou imobilização, uma vez que o nitrato também se reduziu acentuadamente, embora não tenha sido feita análise para a quantificação do N imobilizado e desnitrificado. Além disso, fungos, algas e algumas bactérias também são capazes de utilizar o  $NO_3^-$ , após reduzi-lo a amônia (NEVES, 1992), causando a redução do  $NO_3^-$  no meio. Nestes tratamentos, após 30 dias de incubação, o pH do solo ficou abaixo de 4,9 como conseqüência da alta taxa de nitrificação (Figuras 11 e 12).



**Figura 11** – Teor de amônio, nitrato e pH, no solo arenoso, ao longo de 60 dias de incubação, na temperatura de 35 °C e teor de água de 22%.



**Figura 12** – Teor de amônio, nitrato e pH, no solo argiloso, ao longo de 60 dias de incubação, na temperatura de 35 °C e teor de água de 29%.

As análises de variância da concentração de amônio e nitrato, nos solos argiloso e arenoso, estão apresentadas nas Tabelas 5 e 6, respectivamente.

Os tratamentos umidade, temperatura e tempo diferem significativamente (a 5% pelo teste F) no que se refere ao aumento na concentração de nitrato e redução na concentração do amônio, nos dois solos, exceto quanto ao nitrato no solo arenoso.

Observou-se correlação positiva entre a concentração de  $N-NH_4^+$  e do pH do solo, com relação à concentração de  $N-NO_3^-$  houve correlação com o pH baixa e negativa, nos dois solos, durante o período de incubação (Tabela 7). Essa correlação era esperada, durante a nitrificação ocorre a liberação de  $H^+$  no solo, acidificando-o.

**Tabela 5-** Análise de variância das variáveis amônio e nitrato no solo argiloso.

Fonte Variação	G.L.	Amônio		Nitrato	
		Q.M.	F	Q.M.	F
Temp	2	38.540,1	66,7**	42.045,9	95,0**
Erro (a)	6	578,1	1,2 ns	442,5	0,9 ns
Umid	2	13.6091,3	318,2**	21.929,9	37,7**
Umid x temp	4	1.556,41	3,64*	446,6	0,8 ns
Erro (b)	12	427,67	0,9 ns	581,8	1,1 ns
Dias	5	50.261,4	106,4**	94.904,1	182**
Temp x Dias	10	9.030,4	19,1**	31.541,9	60,6**
Umid x Dias	10	21.045,9	44,6**	18.454,3	35,5**
TempxUmidxDia	20	4.327,9	9,2**	8.657,8	16,6**
Resíduo (c)	90	472,3		520,6	
			C.V. (%) = 17,51	C.V. (%) = 27,13	

Q.M. – Quadrado médio; G.L. – grau de liberdade; \*\* Significativo a 1% de probabilidade, \* Significativo a 5% de probabilidade e ns – não significativo.

**Tabela 6-** Análise de variância das variáveis amônio e nitrato no solo arenoso.

Fonte Variação	G.L.	Amônio		Nitrato	
		Q.M.	F	Q.M.	F
Temp	2	78.256,9	144,9**	14.084,7	16,4**
Erro (a)	6	540,1	0,9 ns	859,8	1,9 ns
Umid	2	81.137,4	135,3**	708,9	1,8 ns
Umid x temp	4	8.147,0	13,6**	2.629,0	6,5**
Erro (b)	12	599,6	0,9 ns	405,4	0,9 ns
Dias	5	162.500,1	260,8**	27.376,4	61,7**
Temp x Dias	10	15.439,6	24,8**	3.268,1	7,4**
Umid x Dias	10	10.390,3	16,7**	6.718,7	15,1**
TempxUmidxDia	20	2.081,9	3,3**	3.581,9	8,1**
Resíduo (c)	90	623,2		443,8	
			C.V. (%) = 12,34	C.V. (%) = 46,22	

Q.M. – Quadrado médio; G.L. – grau de liberdade; \*\* Significativo a 1% de probabilidade e ns – não significativo.

O tempo de incubação das amostras apresentou alta correlação negativa com o amônio e correlação positiva e baixa com o nitrato.

A redução na concentração de  $\text{NH}_4^+$  no solo argiloso teve maior influência da umidade do que da temperatura. No solo arenoso ocorreu o inverso, porque as trocas de calor no solo arenoso são maiores do que no solo argiloso (Tabelas 5 e 6).

**Tabela 7-** Correlação entre as variáveis, para os solos argiloso e arenoso, após 60 dias de incubação.

<b>Tipo de solo</b>	<b>Variáveis</b>	<b>Concentração N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup></b>	<b>Concentração N-NO<sub>3</sub><sup>-</sup></b>
Solo argiloso	<b>TEMP</b>	-0,26	+0,27
	<b>UMID</b>	-0,39	+0,09
	<b>DIAS</b>	-0,49	+0,23
	<b>pH</b>	+0,62	-0,45
Solo arenoso	<b>TEMP</b>	-0,27	+0,23
	<b>UMID</b>	-0,28	-0,01
	<b>DIAS</b>	-0,73	+0,56
	<b>pH</b>	+0,63	-0,41

Nas Tabelas 8 e 9 estão apresentados os parâmetros do modelo e as medidas estatísticas  $R^2$ , a raiz do quadrado médio do resíduo (RQMR), o coeficiente residual de massa (CRM) e o erro máximo (ER), nos dois solos.

Considerando que, em alguns tratamentos, houve falta de substrato a partir de 30 dias de incubação, equações de regressão, para descrever o comportamento do  $\text{NH}_4^+$  e  $\text{NO}_3^-$  ao longo do tempo, foram ajustas apenas para os primeiros 30 dias de incubação. Essas equações foram ajustadas pelo método Quasi-Newton do programa STATISTICA, versão 5.5 (Tabelas 8 e 9).

Como não foi possível ajustar uma equação de regressão que descrevesse a concentração de  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$ , ao longo do tempo, em função da temperatura e teor de água do solo  $f=(t, T, \theta)$ , optou-se por uma abordagem semelhante à descrita McLaren (1969). Este autor considerou que os processos de formação do nitrato e de redução do amônio podem ser descritos por uma equação do tipo cinética de primeira ordem (modelo exponencial simples), equação 2.34. Além disso, as equações ajustadas, para cada tratamento, foram válidas para os intervalos de temperatura e teor de água testados (Tabelas 10 a 14).

**Tabela 8-** Estimativa dos parâmetros  $\hat{C}$  ( $\text{mg kg}^{-1}$ ) e  $\hat{k}$  ( $\text{dia}^{-1}$ ) do modelo exponencial decrescente e as medidas estatísticas  $R^2$ , RQMR, CRM e o ER.

Tipo de solo	Tratamento <sup>(4)</sup>	$\hat{C}$	$\hat{k}$	$R^2$	RQMR <sup>(1)</sup>	CRM <sup>(2)</sup>	ER <sup>(3)</sup>
Solo argiloso	T15U20	198,048**	-0,006•	50,40	15,93	-1,2E-4	21,06
	T15U29	253,527**	-0,063**	97,35	11,48	-4,5E-3	15,46
	T15U42	177,871**	-0,005*	68,62	6,31	-2,0E-5	8,93
	T25U20	182,642**	-0,005*	57,57	5,59	2,0E-5	8,29
	T25U29	244,599**	-0,050**	91,80	25,79	1,2E-2	3,13
	T25U42	250,310**	-0,076**	88,53	7,85	2,0E-3	10,53
	T35U20	172,278	-0,006*	60,65	5,63	1,0E-5	8,52
	T35U29	264,199**	-0,081**	95,25	10,67	2,1E-2	17,98
	T35U42	229,168**	-0,071**	93,44	17,61	1,9E-2	25,52
Solo arenoso	T15U10	318,991**	-0,013**	85,28	12,95	-2,9E-4	19,58
	T15U22	318,629**	-0,014**	74,53	15,25	-3,8E-4	18,88
	T15U35	304,390**	-0,016**	85,95	16,80	-4,6E-4	27,39
	T25U10	313,861**	-0,011*	64,53	25,56	4,0E-4	40,11
	T25U22	319,585**	-0,033**	90,19	29,05	5,0E-3	32,76
	T25U35	308,434**	-0,029**	94,74	12,37	-9,2E-4	17,97
	T35U10	320,826**	-0,013**	73,29	28,02	-3,3E-4	40,94
	T35U22	347,081**	-0,038**	92,09	28,87	6,6E-3	33,04
	T35U35	285,123**	-0,019**	74,72	29,20	3,0E-5	43,79

\*\* Significativo a 1% de probabilidade pelo teste t; \* significativo a 5% de probabilidade; • significativo a 10% de probabilidade; ns – não significativo;  $R^2$  – coeficiente de determinação; <sup>(1)</sup> RQMR é a raiz do quadrado médio do resíduo; CRM<sup>(2)</sup> é o coeficiente residual de massa, ER<sup>(3)</sup> é o erro máximo; T15U42 – representa o tratamento com temperatura de 15 °C e teor de água de 0,42 ( $\text{kg kg}^{-1}$ ).

Os modelos exponenciais ajustados (Tabelas 8 e 9) descrevem uma cinética de primeira e também foram empregadas por WATTS e HANKS (1978), ADDISCOTT (1983), FLOWERS e O'CALLAGHAN (1983) e HANSEN et al. (1990) na modelagem da dinâmica das formas do nitrogênio no solo.

**Tabela 9-** Estimativa dos parâmetros  $\hat{C}$  ( $\text{mg kg}^{-1}$ ) e  $\hat{k}$  ( $\text{dia}^{-1}$ ) do modelo exponencial crescente e as medidas estatísticas  $R^2$ , RQMR, CRM, EF e o ER.

Tipo de Solo	Tratamento <sup>(4)</sup>	$\hat{C}$	$\hat{k}$	$R^2$	RQMR <sup>(1)</sup>	CRM <sup>(2)</sup>	ER <sup>(3)</sup>
Solo argiloso	T15U20	27,979**	0,013**	83,20	2,95	-5,1E-4	5,07
	T15U29	29,156**	0,014**	76,85	4,15	-8,2E-4	6,15
	T15U42	28,772**	0,013**	84,73	2,04	-3,4E-4	2,68
	T25U20	27,709**	0,025**	82,68	1,65	-8,1E-4	2,41
	T25U29	14,683**	0,105**	99,71	9,46	-2,1E-2	14,43
	T25U42	11,534**	0,104**	98,53	9,12	-2,6E-2	13,55
	T35U20	34,087*	0,044**	75,07	11,49	7,2E-3	18,33
	T35U29	54,377**	0,066**	95,36	41,55	2,8E-2	63,75
	T35U42	45,189**	0,067**	92,02	43,55	3,6E-2	65,58
Solo arenoso	T15U10	17,242**	0,006*	99,27	1,09	-7,0E-5	1,51
	T15U22	16,624**	0,011*	61,41	2,61	-5,2E-4	3,68
	T15U35	10,583**	0,012**	80,84	0,36	-1,4E-4	0,49
	T25U10	18,752**	0,019**	78,56	3,13	-1,5E-3	4,62
	T25U22	11,519**	0,080**	99,34	4,34	-1,3E-2	7,46
	T25U35	4,614**	0,034**	97,52	0,36	-1,8E-3	0,59
	T35U10	16,489**	0,033**	94,27	0,52	5,3E-4	0,85
	T35U22	8,028ns	0,107*	87,63	6,53	-2,6E-2	9,44
	T35U35	3,193•	0,088**	89,96	9,93	-4,4E-2	5,97

\*\* Significativo a 1% de probabilidade pelo teste t; \* significativo a 5% de probabilidade; • significativo a 10% de probabilidade; ns – não significativo;  $R^2$  – coeficiente de determinação; <sup>(1)</sup> RQMR é a raiz do quadrado médio do resíduo; CRM<sup>(2)</sup> é o coeficiente residual de massa e ER<sup>(3)</sup> é o erro máximo; T15U42 – representa o tratamento com temperatura de 15 °C e teor de água de 0,42 ( $\text{kg kg}^{-1}$ ).

Na maioria dos tratamentos, as taxas “ $\hat{k}$ ” estimadas estão coerentes com as discussões feitas anteriormente, com tendência de serem maiores onde as temperatura e teor de água do solo foram mais favoráveis à atividade dos microrganismos, ou seja, com temperaturas iguais ou acima de 25 °C e teores de água iguais ou acima da capacidade de campo. BARROS (2005) estudou a mineralização em solos tratados com água residuária da suinocultura (ARS).

Verificou que a constante de mineralização (k) foi sempre maior em temperaturas de 25°C ou 35°C, em relação ao solo sem ARS, enquanto nas temperaturas de 15°C ou 20°C não se observou nenhuma tendência predominante.

Conforme REGAZZI (2003), quando se trabalha com modelos não-lineares, o  $R^2$  sozinho não tem muito significado, o que ocorreu no tratamento T35U42 (Tabela 9, solo argiloso) que, apesar de um  $R^2$  de 92,02, apresentou RQMR de +43,55 e ER de 65,58, mostrando maior erro em relação aos demais tratamentos (Tabela 9). Nos tratamentos em que o valor de CRM foi negativo, os valores obtidos foram subestimados.

De acordo com a literatura (MOREIRA e SIQUEIRA, 2002; VICTORIA et al., 1992), em extremos de temperatura e umidade, a quantidade de nitrato formado e amônio perdido do sistema são muito baixos, ou seja, a atividade metabólica dos microrganismos é baixa. Assim, tanto para nitrato quanto para o amônio foram feitas as seguintes considerações:

Se  $U > U_s$  ou  $U < U_{pmp}$   $\Rightarrow$  as concentrações de  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$  tornam-se nulas.  
ou

Se  $T > 50^\circ\text{C}$  ou  $T < 5^\circ\text{C}$   $\Rightarrow$  as concentrações de  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$  tornam-se nulas.

em que U é o teor de água (base peso);  $U_s$  é o teor de água correspondente à saturação e  $U_{pmp}$  é o teor de água correspondente ao ponto de murcha permanente.

Os maiores e menores teores de água apresentados nas Tabelas 10 a 13 referem-se ao teor de água de saturação ( $U_s$ ) e ao ponto de murcha permanente ( $U_{pmp}$ ), respectivamente, tanto para o solo arenoso quanto para o argiloso.

**Tabela 10** – Valores de  $\hat{k}_2$  e  $\hat{C}_2$  a serem adotados nas funções exponenciais para as concentrações de  $\text{NO}_3^-$ , em solo arenoso, em função da faixa de temperatura e teor de água do solo.

Temperatura (°C)	Teor água (kg kg <sup>-1</sup> )	$\hat{k}_2$	$\hat{C}_2$
5 < T < 20	10 < U < 16	0,006	17,242
5 < T < 20	16 ≤ U ≤ 28,5	0,011	16,624
5 < T < 20	28,5 < U < 37,4	0,012	10,583
20 ≤ T ≤ 30	10 < U < 16	0,019	18,752
20 ≤ T ≤ 30	16 ≤ U ≤ 28,5	0,080	11,519
20 ≤ T ≤ 30	28,5 < U < 37,4	0,034	4,614
30 < T < 50	10 < U < 16	0,033	16,489
30 < T < 50	16 ≤ U ≤ 28,5	0,107	8,028
30 < T < 50	28,5 < U < 37,4	0,088	3,193

**Tabela 11** – Valores de  $\hat{k}_2$  e  $\hat{C}_2$  a serem adotados nas funções exponenciais para as concentrações de  $\text{NO}_3^-$ , em solo argiloso, em função da faixa de temperatura e teor de água do solo.

Temperatura (°C)	Teor água (kg kg <sup>-1</sup> )	$\hat{k}_2$	$\hat{C}_2$
5 < T < 20	20 < U < 24,5	0,013	27,979
5 < T < 20	24,5 ≤ U ≤ 35,5	0,014	29,156
5 < T < 20	35,5 < U < 44,4	0,013	28,772
20 ≤ T ≤ 30	20 < U < 24,5	0,025	27,709
20 ≤ T ≤ 30	24,5 ≤ U ≤ 35,5	0,105	14,683
20 ≤ T ≤ 30	35,5 < U < 44,4	0,104	11,534
30 < T < 50	20 < U < 24,5	0,044	34,087
30 < T < 50	24,5 ≤ U ≤ 35,5	0,066	54,377
30 < T < 50	35,5 < U < 44,4	0,067	45,189

**Tabela 12** – Valores de  $\hat{C}_1$  e  $\hat{k}_1$  a serem adotados nas funções exponenciais para concentração de  $\text{NH}_4^+$ , em solo arenoso, em função da faixa de temperatura e teor de água do solo.

Temperatura (°C)	Teor água (kg kg <sup>-1</sup> )	$\hat{k}_1$	$\hat{C}_1$
5 < T < 20	10 < U > 16	-0,013	318,991
5 < T < 20	16 ≤ U ≤ 28,5	-0,014	318,629
5 < T < 20	28,5 > U < 37,4	-0,016	304,390
20 ≤ T ≤ 30	10 < U > 16	-0,011	313,861
20 ≤ T ≤ 30	16 ≤ U ≤ 28,5	-0,033	319,585
20 ≤ T ≤ 30	28,5 > U < 37,4	-0,029	308,434
30 < T < 50	10 < U > 16	-0,013	320,826
30 < T < 50	16 ≤ U ≤ 28,5	-0,038	347,081
30 < T < 50	28,5 > U < 37,4	-0,019	285,123

**Tabela 13** – Valores de  $\hat{C}_1$  e  $\hat{k}_1$  a ser adotado nas funções exponenciais para concentração de  $\text{NH}_4^+$ , em solo argiloso, em função da faixa de temperatura e teor de água do solo.

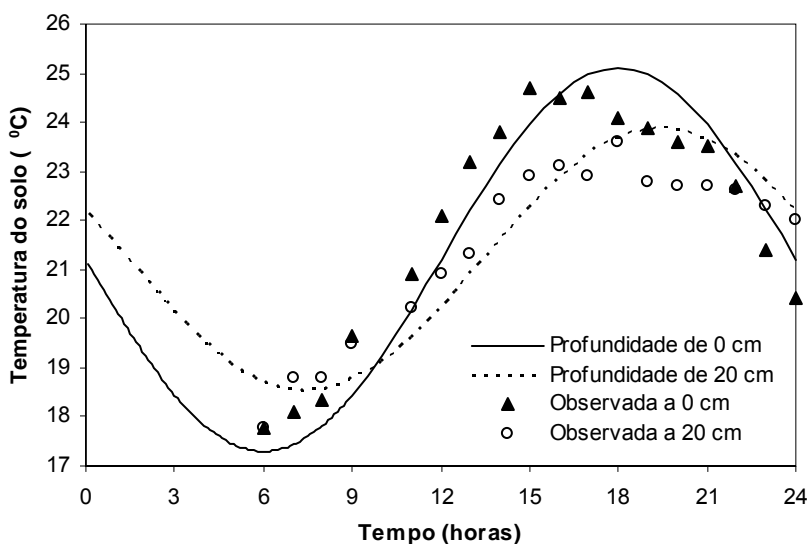
Temperatura (°C)	Teor água (kg kg <sup>-1</sup> )	$\hat{k}_1$	$\hat{C}_1$
5 < T < 20	20 < U < 24,5	-0,006	198,048
5 < T < 20	24,5 ≤ U ≤ 35,5	-0,063	253,527
5 < T < 20	35,5 < U < 44,4	-0,005	177,871
20 ≤ T ≤ 30	20 < U < 24,5	-0,005	182,642
20 ≤ T ≤ 30	24,5 ≤ U ≤ 35,5	-0,050	244,599
20 ≤ T ≤ 30	35,5 < U < 44,4	-0,076	250,310
30 < T < 50	20 < U < 24,5	-0,006	172,278
30 < T < 50	24,5 ≤ U ≤ 35,5	-0,008	264,199
30 < T < 50	35,5 < U < 44,4	-0,071	229,168

### 4.3. Avaliação do modelo de temperatura do solo

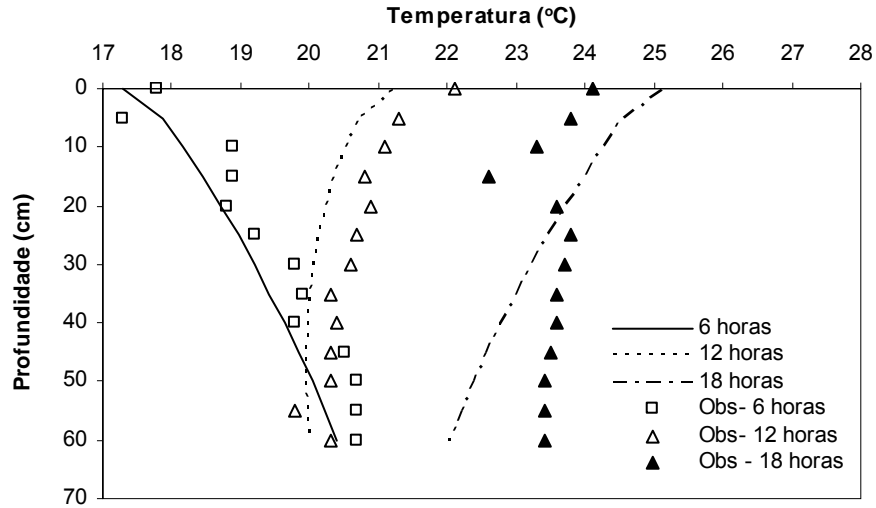
O modelo de temperatura do solo emprega os valores de teor de água calculados utilizando-se a equação de Richards, como dado de entrada para cálculo da temperatura do solo, ao longo do tempo e em profundidade, diariamente.

Nas Figuras 13, 14, 15, 16 estão apresentados as temperaturas, para o solo arenoso e argiloso, observados experimentalmente e simuladas utilizando-se o modelo analítico proposto, ao longo do tempo e em profundidade, em 10/6/04.

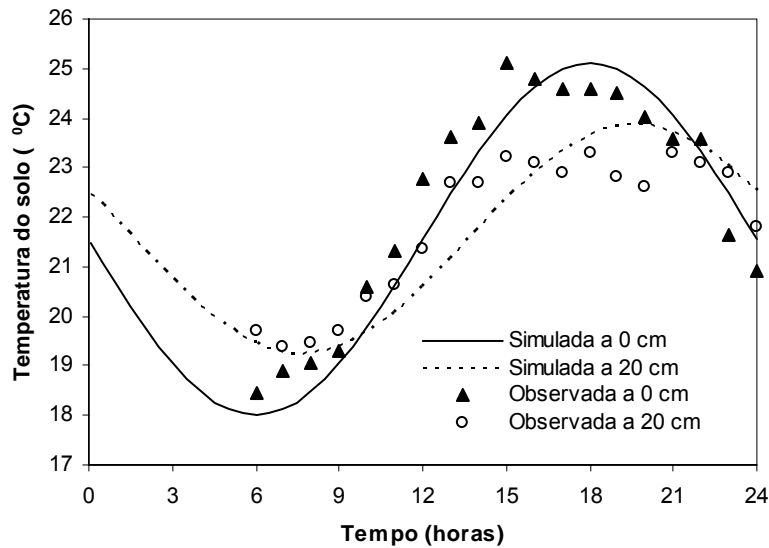
As temperaturas máximas e mínimas médias durante o experimento, em 10/6 foram: 25,1 e 18,0 °C (solo argiloso) e 25,1 e 17,3 °C (solo arenoso). Esses valores observados experimentalmente são valores de entrada na simulação realizada com o modelo analítico.



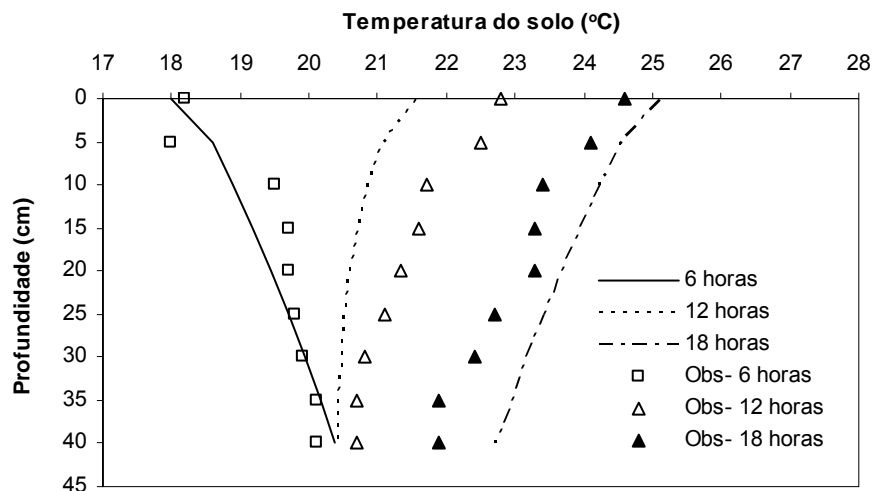
**Figura 13**– Comparação entre os dados de temperatura do solo arenoso, observados experimentalmente e simulados pelo SIMASS\_C, ao longo de 24 horas e em duas profundidades.



**Figura 14**– Comparação entre os dados de temperatura do solo arenoso, observados experimentalmente e simulados pelo SIMASS\_C, ao longo do perfil do solo, em três horários.



**Figura 15**– Comparação entre os dados de temperatura do solo argiloso, observados experimentalmente e simulados pelo SIMASS\_C, ao longo de 24 horas e em duas profundidades.



**Figura 16**– Comparação entre os dados de temperatura do solo argiloso, observados experimentalmente e simulados pelo SIMASS\_C, ao longo do perfil do solo, em diferentes horários.

Com base nos dados experimentais, observou-se que a amplitude térmica do solo arenoso foi ligeiramente superior à do solo argiloso. Esta tendência foi observado ao longo de todo o experimento, embora aqui esteja apresentado apenas o resultado do dia 10/6. Esta tendência é esperada, haja vista que no solo arenoso predomina material constituído por quartzo, que tem como característica alta condução de calor. Assim, ele se aquece mais rapidamente e também perde calor mais facilmente, daí ocorrer maior amplitude térmica. O solo argiloso, diferentemente, apresenta maior conteúdo de argila e matéria orgânica, maus condutores de calor.

As amplitudes térmicas observadas em 10/6/04 foram de 7,1°C e 7,8 °C, no solo argiloso e arenoso, respectivamente. Essas foram maiores na superfície que em profundidade, o que já era esperado. A amplitude térmica do dois solos foram pequenas, pois a radiação solar também foi pequena, porque o experimento foi conduzido em laboratório, no período de inverno e, conseqüentemente, sob baixa radiação incidente.

O erro máximo na estimativa da temperatura do solo neste dia foi de 1,5 °C no solo argiloso, tanto ao longo do tempo (Figura 13) quanto em profundidade

(Figura 14). No solo arenoso, a variação máxima no tempo foi de 1,38°C (Figura 13) e de 1,9 °C, em profundidade (Figura 16).

Nas Figuras 13 e 15, verifica-se que o modelo analítico tendeu a subestimar a temperatura do solo, a partir das 9h da manhã, até entre 16 e 17 horas da tarde, justamente no período de incidência de radiação solar. A partir das 17 horas, o modelo tendeu a superestimar a temperatura do solo. Embora não tenha sido apresentado as temperaturas de hora em hora nas Figuras 14 e 16, o modelo proposto descreveu a inversão de gradiente térmico. Por exemplo, na Figura 14, às 6h da manhã, a temperatura observada e simulada foi menor na superfície do que em profundidades do solo, coerente com o comportamento físico do fenômeno, isto é, o solo perdeu calor à partir da superfície, assim, ele se esfriou durante a noite, de forma que essa perda de calor foi maior na superfície e menor em profundidade. De forma inversa, quando a radiação começou a incidir na superfície, o aquecimento se deu de forma mais rápida na superfície e menor em profundidade.

Com base nos dados experimentais coletados diariamente durante 30 dias, pode-se observar que a temperatura do solo tornou-se praticamente constante, entre 35 cm e 60 cm de profundidade. A temperatura média do solo foi de 20,6 °C no solo arenoso e de 20,3 °C no solo argiloso. Ao longo do experimento, as temperaturas máximas e mínimas do solo foram de 28,9 e 14,6 °C, no solo arenoso e de 28,9 e 14,9 °C, no solo argiloso. Portanto, os parâmetros  $\hat{C}$  e  $\hat{k}$  (Tabelas 10 a 13), utilizados pelas funções mineralizadora/nitrificadora ficaram, em grande parte, dentro da faixa de 20 a 30°C, e nunca a acima de 30 °C.

De maneira geral, o modelo estima com boa precisão a temperatura do solo. E importante ressaltar que erros na estimativa da temperatura do solo induz a erros de estimativa da concentração de nitrato e amônio, considerando o termo fonte ou sumidouro de soluto. No entanto, como as equações ajustadas eram validas para intervalos de temperatura e umidade (Tabelas 10 a 13), o erro cometido na estimativa da temperatura do solo torna-se pequeno ou até mesmo desprezível.

Partindo do pressuposto de que no modelo utilizado considerou-se que o solo é homogêneo, exposto à radiação solar e que o teor de água no solo é constante (PREVEDELLO, 1996), concluiu-se que o modelo foi eficiente na estimativa da temperatura do solo.

#### 4.4. Características físico-hídricas dos solos

O sucesso dos modelos matemáticos desenvolvidos para descrever o transporte de solutos no solo depende do grau de confiabilidade dos parâmetros de transporte envolvidos. Assim, os parâmetros da curva de retenção bem como o fator de retardamento e o coeficiente dispersivo-difusivo são variáveis importantes. CORRÊA (2001), ao simular a movimentação de nitrato em colunas de solo, atribui parte dos erros obtidos à determinação inadequada dos dados de entrada do modelo, provocados pela variabilidade apresentada nas colunas de solo montadas em laboratório. 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 nos parâmetros de transporte.

Os parâmetros da curva de retenção ajustados para o modelo de Van Genuchten, nos solos arenoso e argiloso, estão apresentados na Tabela 14.

**Tabela 14-** Parâmetros usados na simulação da curva de retenção do solo arenoso e argiloso.

Parâmetros do modelo	solo arenoso		solo argiloso
	(0-40 cm)	(40-60 cm)	(0-40 cm)
$\theta_s$	0,3740	0,3730	0,4440
$\theta_r$	0,0180	0,1070	0,0100
$\alpha$	0,9081	0,5366	1,5345
n	1,5151	1,3065	1,0568

Nas Tabelas 15 e 16 estão apresentados os parâmetros de transporte utilizados como dado de entrada do modelo SIMASS\_C, simulação da dinâmica dos íons nitrato e amônio no solo, respectivamente. Estes valores foram obtidos em condições de solo saturado. Nessas Tabelas, nota-se maior dispersividade para a concentração de nitrato em relação à de amônio, indicando tendência de maior variação no perfil de distribuição do primeiro em relação ao segundo, fato também observado por MIRANDA (2001).

**Tabela 15-** Parâmetros de transporte do **nitrato**: velocidade da água nos poros ( $v$ ), coeficiente de dispersão-difusão ( $D$ ), fator de retardamento ( $R$ ), dispersividade ( $\lambda$ ) e coeficiente de partição ( $K_d$ ).

Tipo de Solo	Parâmetros de transporte do nitrato			
	$D$ ( $\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$ )	$R$	$\lambda$ (cm)	$K_d$
Argiloso (0-40 cm)	201,28	1,252	12,52	0,112
Arenoso (0-40 cm)	233,25	1,223	4,89	0,083
Arenoso (40-60 cm)	681,57	1,091	7,17	0,034

**Tabela 16-** Parâmetros de transporte do **amônio**: velocidade da água nos poros ( $v$ ), coeficiente de dispersão-difusão ( $D$ ), fator de retardamento ( $R$ ), dispersividade ( $\lambda$ ) e coeficiente de partição ( $K_d$ ).

Tipo de Solo	Parâmetros de transporte do amônio			
	$D$ ( $\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$ )	$R$	$\lambda$ (cm)	$K_d$
Argiloso (0-40 cm)	41,119	3,299	2,554	1,021
Arenoso (0-40 cm)	121,43	2,964	2,548	0,734
Arenoso (40-60 cm)	171,297	1,825	1,801	0,308

Estudos desenvolvidos por PADILLA et al. (1999) sugerem que a dispersividade é característica hidrodinâmica do meio, ou seja, depende da geometria do meio poroso e do teor de água no solo, e tem maiores valores em condições de fluxo não-saturado.

A adsorção de íons é maior em solos com maiores coeficientes de partição " $K_d$ " e maior fator de retardamento " $R$ ". Segundo VALOCCHI (1984), este último

fator representa a defasagem existente entre a velocidade de avanço do soluto e a velocidade de avanço da frente de molhamento da solução percolante, sendo a primeira menor quando há interação entre os solutos e os componentes da fase sólida do solo.

Nos dois solos, houve maiores valores de  $K_d$  e R para o íon amônio em relação ao nitrato, fato já esperado. Observou-se, respectivamente, aos 3 dias e aos 30 dias de coleta médias de  $\Delta\text{pH}$  entre +0,013 e -0,044, no solo argiloso e -0,011 e -0,042, no solo arenoso, com valores próximos da neutralidade, mas com ligeira tendência de predominância de cargas negativas nesses solos, ou seja,  $\Delta\text{pH}$  negativo. Essas características favorecem a movimentação do íon nitrato e a retenção do íon amônio, embora, segundo OLIVEIRA et al. (2000b), o  $\Delta\text{pH}$  não seja um bom critério para prever a adsorção de nitrato.

Em solos brasileiros, principalmente nas de cerrado, com alto grau de intemperismo, a mineralogia da fração argila é dominada por argilas silicatadas do tipo 1:1 e óxidos de Fe e Al, que apresentam cargas dependentes de pH (FONTES, 1996, citado por WOLSCHICK, 2004). Nesses solos, a matéria orgânica e a caulinita são as principais fontes de cargas negativas (OLIVEIRA et al.; 2000b). No entanto, nas camadas inferiores do solo, com o decréscimo de matéria orgânica, os valores de  $\Delta\text{pH}$  podem se aproximar de zero ou se tornar positivos, retendo os íons de nitrato, o que é esperado em Latossolos e Argissolos, devido ao alto valor de PCZ.

O fato de o solo argiloso ter apresentado maiores valores de  $K_d$  e R, em relação ao solo arenoso, está associado à existência de poros de maior diâmetro (macroporos) neste último, o que significa maior velocidade da água nos poros e menor interação com a matriz. Além disto, o solo argiloso apresentou maior CTC, que o solo arenoso.

Em solos de regiões de clima temperado, JOHNSON et al. (1999) encontraram valor de  $K_d$  para nitrato igual a 0,115. Por outro lado, MIRANDA et al. (2002), citado por WOLSCHICK (2004), trabalhando com um Latossolo Vermelho Amarelo, textura franco-arenosa, da região de São Paulo, obteve valores de  $K_d$  de 0,086, estando próximos aos valores encontrados nesse trabalho. MIRANDA

(2001) estudou o movimento de nitrato em colunas de solo arenoso. Obteve valores de R para nitrato de 1,34; superior aos obtidos no experimento em colunas.

COELHO et al. (2000), analisaram amostras com diferentes tamanhos de agregados de um Latossolo Vermelho distrófico (LVd) da região de Sete Lagoas, textura argilosa. Eles encontraram valores de R para amônio variando de 2,0 a 3,4, similares com os valores observados nesse trabalho. Esses mesmos autores constataram que os maiores valores de R ocorreram em agregados de menor tamanho e que o transporte de amônio no solo se deu, predominantemente, por dispersão.

#### **4.5. Simulação da distribuição de água no solo**

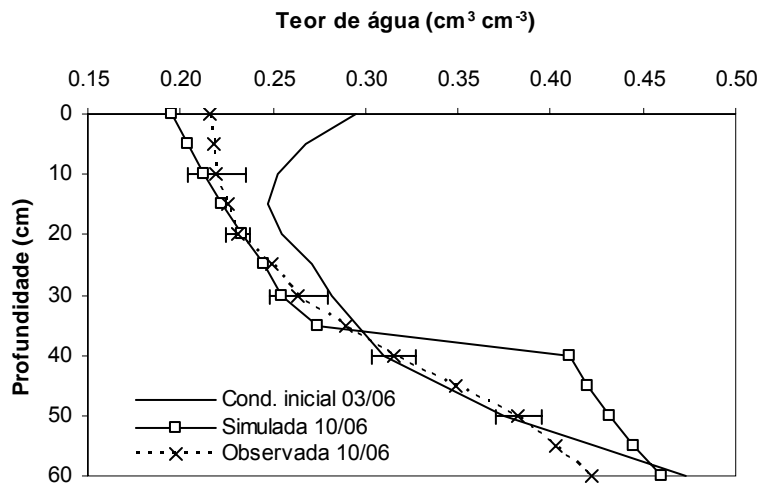
Nas Figuras 17, 18, 19 e 20 estão apresentados os perfis de teor de água simulados pelo modelo e observados experimentalmente, nas três épocas de amostragem e nos dois solos estudados. Nessas Figuras, também estão exibidos os desvios padrões dos dados.

Nas Figuras 17 e 18 estão mostrados os perfis de teor de água média do solo das amostras retiradas em 10/6/04, no solo arenoso e argiloso, respectivamente, mostrando os resultados de 7 dias de simulação (entre 3/06 e 10/6), considerando fluxo zero na base e evaporação na superfície do solo.

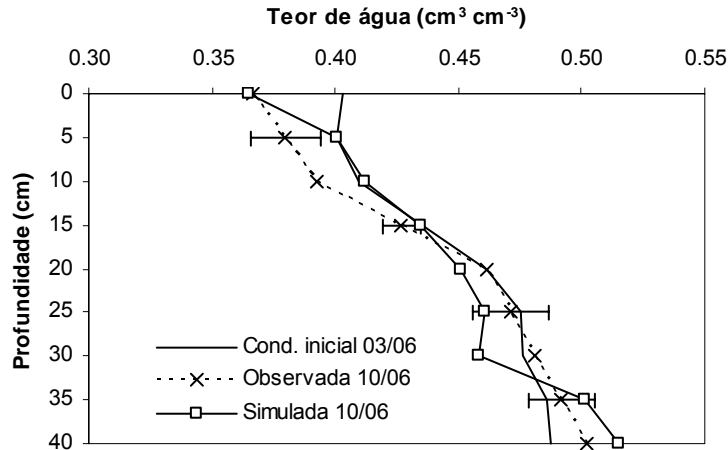
Vê-se nas Figuras 17 e 18, que grande parte dos erros cometidos na estimativa do teor de água do solo ao longo do perfil do solo estão dentro do intervalo estabelecido pelo desvio padrão dos dados observados, exceto no solo arenoso e na profundidade abaixo de 40 cm.

Os perfis de umidade simulados para os dias 10/6, 20/6 e 30/6, apresentados nas Figuras 17 a 20, ficaram em parte, dentro do intervalo definido pelo desvio padrão dos dados. Os valores de RQMR e ER (Tabela 17) mostram que os menores erros foram observados para a simulação em 10/6, no solo argiloso.

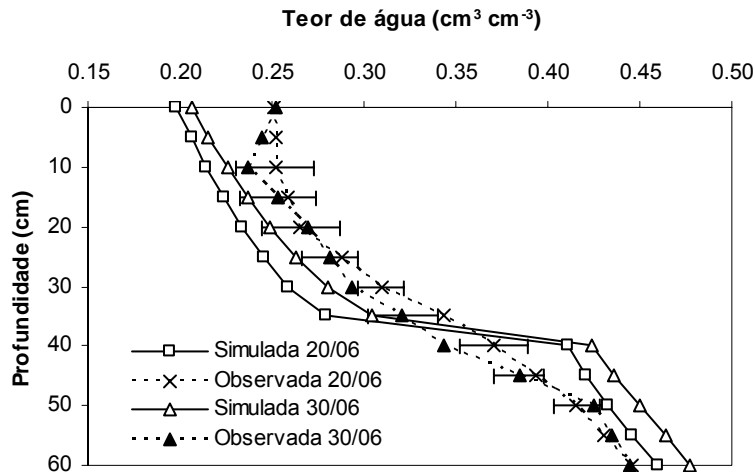
Em termos de movimentação de água e analisando os valores de RQMR, CRM, EF e ER (Tabela 17), e as Figuras 17 e 18, observou-se que os valores simulados aproximaram-se, dos valores observados, exceto no solo argiloso (simulação em 30/6) e no solo arenoso, Figuras 17 e 19, respectivamente. No último solo houve uma superestimativa do teor de água em profundidades abaixo de 40 cm, devido à estratificação do solo arenoso e conseqüente mudança nos parâmetros da curva de retenção, representada pelo modelo de Van Genuchten (Tabela 14). Além disso, a condutividade hidráulica no nó  $i$ , utilizada pelo SIMASS-C, é dada pela média das condutividades nos nós  $i-1$  e  $i+1$ , ou seja, pela média de  $K$  dos nós adjacentes. Isto explica a mudança brusca da umidade na interface entre as camadas do solo arenoso, pois as condutividades hidráulicas nas duas camadas foram diferentes. A alternativa para reduzir essa discrepância seria diminuir o  $\Delta z$  de simulação.



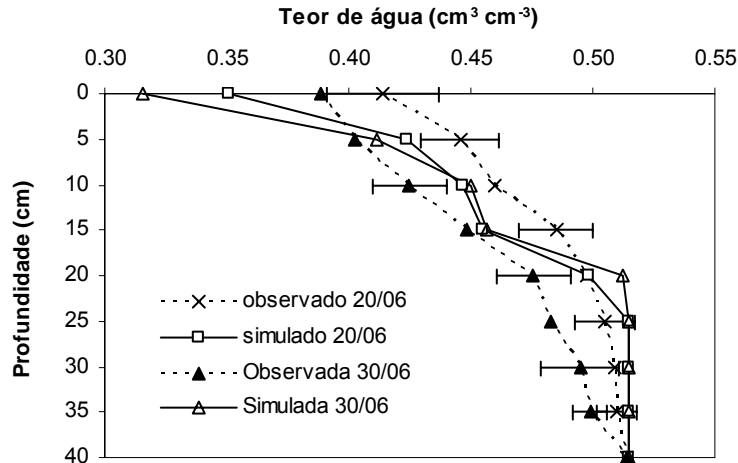
**Figura 17**– Perfil de umidade do solo arenoso, observado experimentalmente e simulado pelo modelo SIMASS-C, em 10/6/2004, considerando fluxo na superfície da coluna ( $\Delta z = 5$  cm e  $\Delta t = 0,1$  hora).



**Figura 18**– Perfil de umidade do solo argiloso, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, em 10/06/2004, considerando fluxo na superfície da coluna ( $\Delta z = 5 \text{ cm}$  e  $\Delta t = 0,1 \text{ hora}$ ).



**Figura 19**– Perfil de umidade do solo arenoso, observado experimentalmente e simulado pelo modelo SIMASS-C, 10 dias após aplicação da 1ª lâmina de irrigação (20/6) e após aplicação da 2ª lâmina de irrigação (30/6), considerando  $\Delta z = 5 \text{ cm}$  e  $\Delta t = 0,1 \text{ hora}$ .



**Figura 20**– Perfil de umidade do solo argiloso, observado experimentalmente e simulado pelo Modelo SIMASS-C, 10 dias após aplicação da 1ª lâmina de irrigação (20/06) e após aplicação da 2ª lâmina de irrigação (30/06), considerando  $\Delta z = 5$  cm e  $\Delta t = 0,1$  hora.

**Tabela 17**- Coeficientes estatísticos RQMR, CRM, EF e ER usados para avaliar o modelo SIMASS\_C quanto à distribuição do teor de água no perfil do solo em três datas.

Solo	Data	RQMR*	CRM*	EF*	ER*
arenoso	10/6	0,04	-0,06	0,69	0,09
	20/6	0,04	0,06	0,70	0,06
	30/6	0,04	-0,01	0,77	0,08
argiloso	10/6	0,02	-0,01	0,91	0,02
	20/6	0,03	0,02	0,41	0,11
	30/6	0,03	-0,02	0,43	0,07

\* Valores ideais: RQMR=0; CRM=0; EF=1 e ER=0.

Os perfis de umidade simulados para o dia 10/6 apresentaram tendência em subestimar o teor de água (CRM's negativos); o erro (ER) na estimativa da umidade foi menor no solo argiloso (Tabela 17). Apesar de subestimar a umidade, o modelo apresentou boa eficiência, principalmente para o solo argiloso (EF=0,91).

Conforme apresentado na Tabela 17, para o solo arenoso e argiloso, nota-se que pela simulação do dia 30/6 o modelo também subestima a umidade (CRM negativo) enquanto no dia 20/6 ocorreu superestimação (CRM positivo) pelo modelo, e os erros (ER) foram maiores no solo argiloso.

As Figuras 19 e 20 referem-se a amostras retiradas em 20/6/04 e 30/6/04, no solo arenoso e argiloso, respectivamente. O perfil correspondente a 20/6/04 é resultado de uma irrigação realizada em 10/6/07, com lâmina média de 61 mm, no solo arenoso, e de 32,1 mm, no solo argiloso. Durante esse período, para os dois solos, as condições de contorno para simulação eram mudadas à medida que cenário exigia, ou seja, em 10/6 houve fluxo na superfície (infiltração) durante a irrigação sem fluxo na base e, cessada a irrigação passou a haver fluxo na superfície (evaporação) com fluxo de água na base (percolação). Cessada a percolação, passou a haver apenas evaporação na superfície, até dia 20/6.

Por último, o perfil correspondente a 30/6/04 é resultado de uma irrigação realizada em 20/6/07, com lâmina média aplicada de 21 mm (solo arenoso) e 22,3 mm (solo argiloso). Durante o período de simulação, as condições de contorno também foram mudadas à medida que cenário ia alterando, da seguinte forma: em 20/6 houve fluxo na superfície (infiltração) durante a irrigação sem fluxo na base e, cessada a irrigação, passou a haver fluxo na superfície (evaporação) sem fluxo de água na base, permanecendo assim até 30/6.

Analisando os valores de RQMR, CRM, EF e ER (Tabela 17) e as Figuras 19 e 20, observaram-se boas estimativas dos conteúdos de água para as simulações em 20/6 e 30/6, tanto para o solo arenoso quanto no argiloso. Os mesmos comentários feitos anteriormente, sobre o erro na estimativa ocorrido para a camada de 40-60 cm, do solo arenoso, se aplicam a essas simulações. Ainda sobre este solo, o modelo subestimou os valores de umidade na camada de 0-40 cm. Provavelmente esse erro seja devido à subestimação na condutividade hidráulica estimada pelo modelo de Van Genuchten ou mesmo a erros experimentais na determinação da condutividade hidráulica saturada.

Os teores de água na simulação de 20/6, para o solo arenoso (Figura 17), são menores quando comparados com as de 30/6. Isto se explica devido ao fato

que neste período (10 a 20/6), além da evaporação, ocorreu lixiviação na base da coluna, o que não aconteceu no período de 20 a 30/6, representado pelo perfil de umidade do dia 30/6.

No solo argiloso, houve superestimação dos conteúdos de água em 20/6 e subestimação em 30/6 (Figuras 19 e 20 e Tabela 17), embora os erros na estimativa da umidade tenham sido menores quando comparados com o solo arenoso, como pode ser visto pelo ER (Tabela 17).

Nas três épocas simuladas e para os dois solos analisados, a eficiência do modelo foi menor nas duas últimas épocas de simulação do solo argiloso.

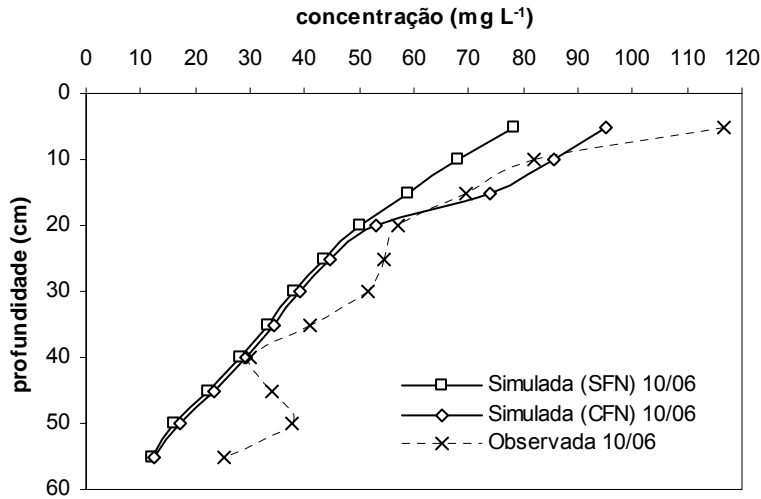
#### **4.6. Movimentação do nitrogênio no solo**

Os resultados da movimentação do nitrato e amônio nas colunas serão apresentados e discutidos em função dos valores simulados pelo modelo e determinados experimentalmente, em laboratório.

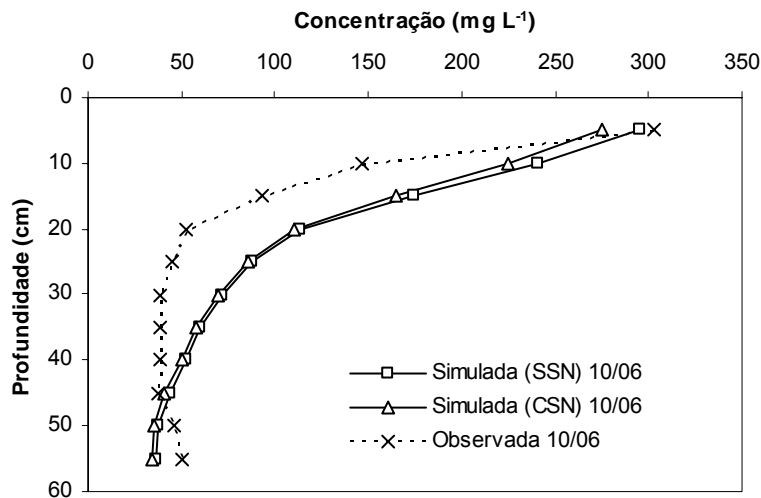
Nas simulações com o nitrato, o acréscimo de  $\text{NO}_3^-$ , devido à nitrificação, se deu nos nós existentes até 20 cm de profundidade, sendo representado pelo termo “com fonte de nitrogênio (CFN)”. Essa medida foi adotada porque a aplicação de N foi feita na base superior da coluna e as funções. Procedimento semelhante foi implementado nas simulações com o amônio, porém o termo foi “sumidouro de nitrogênio (CSN)”, que representa a perda de amônio.

##### **4.6.1. Simulação da distribuição de nitrato e amônio em solo arenoso**

Nas Figuras 21a e 21b estão apresentados os perfis de concentração do nitrato e amônio, respectivamente, observados experimentalmente e simulados pelo Modelo SIMASS-C, sem fonte de nitrogênio (SFN) e com fonte de nitrogênio (CFN), para o  $\text{NO}_3^-$ , e sem sumidouro de nitrogênio (SSN) e com sumidouro de nitrogênio (CSN), para o  $\text{NH}_4^+$ , em 10/06.



(a)



(b)

**Figura 21**– Perfis de concentração de  $\text{NO}_3^-$  (a) e  $\text{NH}_4^+$  (b) em solo arenoso, observados experimentalmente e simulados pelo Modelo SIMASS-C, sem fonte de N (SFN) e com fonte de N (CFN), para o  $\text{NO}_3^-$ , e sem sumidouro N (SSN) e com sumidouro de N (CSN), para o  $\text{NH}_4^+$ , em 10/6/2004.

As simulações em dia 10/6 forneceram boas estimativas da concentração de  $\text{NO}_3^-$  (Figura 21a) e  $\text{NH}_4^+$  (Figura 21b), conforme apresentado na Tabela 18. Nesse caso, a semelhança dos perfis era esperada, uma vez que não houve, nesse período, a aplicação de lâmina de irrigação, isto é, não houve frente de molhamento para deslocar o  $\text{NO}_3^-$  e o  $\text{NH}_4^+$ .

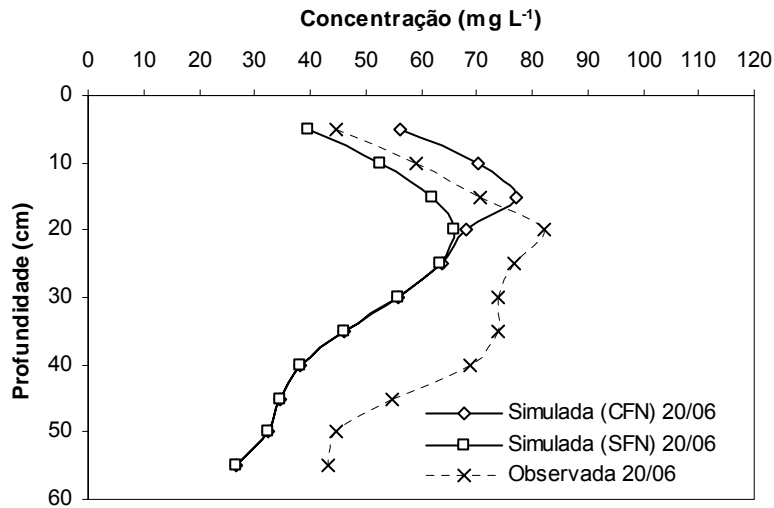
**Tabela 18-** Valores dos coeficientes estatísticos RQMR, CRM, EF e ER usados para avaliar o modelo SIMASS\_C quanto à distribuição de nitrato e amônio no perfil do solo arenoso, nas três épocas analisadas.

Íon	Data	RQMR*	CRM*	EF*	ER*
Nitrato	10/6	11,26	0,14	0,91	21,67
	20/6	17,22	-0,37	-0,23	30,42
	30/6	30,28	0,08	0,03	53,57
Amônio	10/6	45,41	-0,31	0,86	94,11
	20/6	43,60	0,33	0,71	93,20
	30/6	78,65	1,67	-2,33	202,48

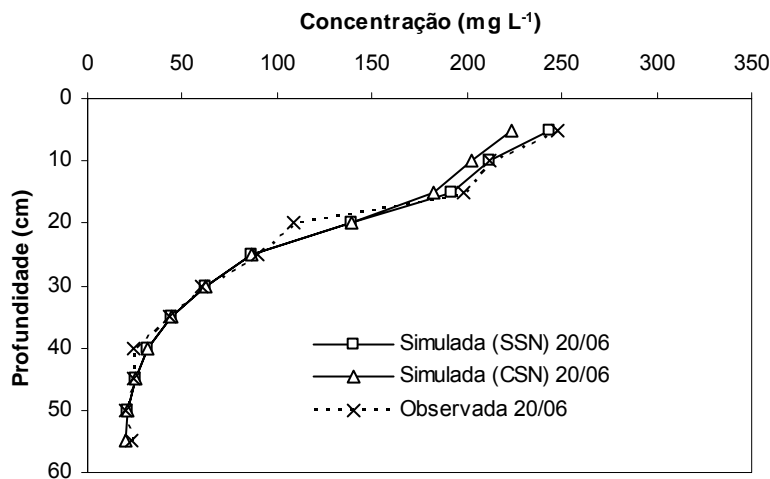
\* Valores ideais: RQMR=0; CRM=0; EF=1 e ER=0.

A concentração  $\text{NO}_3^-$  foi superestimada pelo modelo em 10/6, enquanto com o  $\text{NH}_4^+$  ocorreu o inverso (Tabela 18). Por outro lado, o erro (ER) entre os dados simulados e os obtidos experimentalmente foram maiores para o amônio em relação ao nitrato, como mostra o RQMR e o ER (Tabela 18), devido à magnitude dos dados. O modelo também se mostrou eficiente (EF próximo de 1) na estimativa das concentrações de  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$  em 10/6.

As simulações, considerando o termo fonte de N (CFN) ou sumidouro de N (CSN), permitiram pequena melhoria na estimativa da concentração de  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$  (Figuras 21a e 21b). Provavelmente, o modelo empírico, do tipo exponencial, pode não ter sido o mais adequado para descrever as reações biológicas sofridas pelo nitrogênio. Além disso, as simulações de  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$  foram feitas até a profundidade de 20 cm e, por isso, o efeito dos perfis de concentração, considerando os termos CFN e CSN, são mais evidentes até esta profundidade. Logo, a escolha das funções mineralizadoras/nitrificadoras foi feita dentro de um intervalo de temperatura e umidade (Tabelas 10 a 13), levando a erros na estimativa do incremento de concentração de  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$  a ser acrescentado ou retirado nos nós, respectivamente, ao longo do tempo.



(a)



(b)

**Figura 22**– Perfis de concentração de  $\text{NO}_3^-$  (a) e  $\text{NH}_4^+$  (b) em solo arenoso, observados experimentalmente e simulados pelo Modelo SIMASS-C, sem fonte de N (SFN) e com fonte de N (CFN), para o  $\text{NO}_3^-$ , e sem sumidouro N (SSN) e com sumidouro de N (CSN), para o  $\text{NH}_4^+$ , 10 dias após aplicação da 1ª lâmina de irrigação (20/6).

A diferença nos perfis de concentração observados (Figura 21a e 22a) indica a forte influência que a componente convectiva tem sobre o movimento de  $\text{NO}_3^-$  no solo, pois logo após a aplicação de uma lâmina de irrigação o conteúdo de água no solo se eleva para próximo da saturação e o deslocamento do  $\text{NO}_3^-$  ocorre por fluxo de massa.

Houve ligeiro aumento na concentração de  $\text{NH}_4^+$  observada em 10/6 até cerca de 20 cm de profundidade (Figura 22b), em relação à concentração observada em 20/6 (Figura 21b). Este fato mostra que a irrigação promoveu lixiviação de  $\text{NH}_4^+$  no solo. Como o perfil de  $\text{NH}_4^+$  (Figura 22b) foi obtido 10 dias após a 1ª irrigação, ocorreu redistribuição de água e dispersão de  $\text{NH}_4^+$ , não sendo tão evidente picos de concentração de  $\text{NH}_4^+$  como foi verificado com o íon  $\text{NO}_3^-$  (Figura 22a).

FERREIRA et al. (1990), trabalharam com movimentação de  $\text{NO}_3^-$  em colunas de solo. Observaram a ocorrência de fluxo de massa 4 horas após a irrigação, em virtude da quase saturação do meio poroso e acentuada dispersão de  $\text{NO}_3^-$ , 48 horas após a irrigação.

A simulação da concentração de  $\text{NO}_3^-$  em 20/6 (Figura 22a) foi subestimada (Tabela 18), apresentando baixa eficiência (EF negativo) e maiores erros (ER) em relação a 10/6. Houve superestimativa da concentração do  $\text{NH}_4^+$ , apesar de o modelo apresentar boa eficiência (Tabela 18). Os erros encontrados ao se estimar a concentração de  $\text{NO}_3^-$  foram menores em relação à de  $\text{NH}_4^+$ , como indicam os valores de RQMR e ER (Tabela 18) devido à magnitude dos valores de concentração de  $\text{NH}_4^+$  em relação ao  $\text{NO}_3^-$  e maior mobilidade deste último, permitindo maiores variações no perfil ao longo do tempo.

Os perfis de concentração em 30/6 (Figura 23a) mostram o efeito da aplicação de uma lâmina de irrigação de 21 mm no solo, o que favoreceu a movimentação de  $\text{NO}_3^-$  no solo e reduções na concentração de  $\text{NH}_4^+$ , bem como reações de nitrificação e mineralização/imobilização, entre outras. Fato interessante pode ser evidenciado nos perfis de concentração de  $\text{NO}_3^-$  observados em 20/6 (Figura 22a) em relação aos do dia 30/6 (Figura 23a), que mostram aumento do  $\text{NO}_3^-$  na camada até 25 cm (em 30/6) e decréscimo nas profundidades inferiores. Analisando-se os perfis de concentração observados de  $\text{NH}_4^+$  nesse período (Figuras 22b e 23b), verifica-se redução do mesmo, evidenciando claramente o processo de nitrificação do amônio após a 2ª irrigação, ou seja, a transformação do  $\text{NH}_4^+$  em  $\text{NO}_3^-$ , explicando em parte o aumento da concentração de  $\text{NO}_3^-$  até a profundidade de 25 cm.

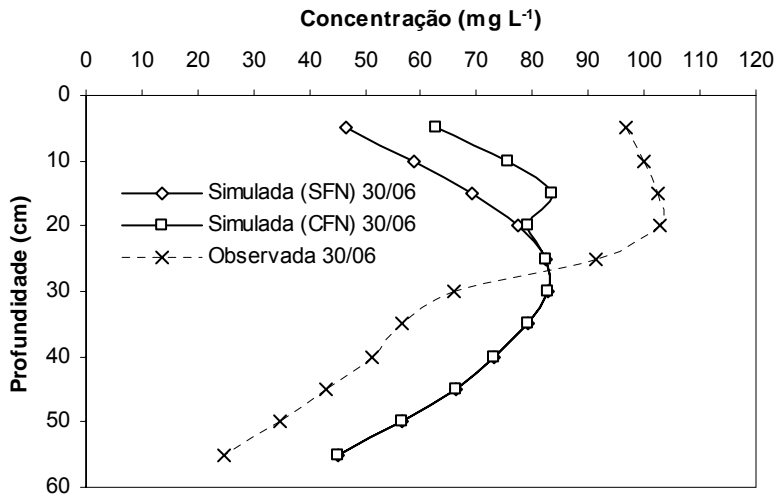
Contudo, nas profundidades abaixo de 25 cm ocorreu brusca redução da concentração de  $\text{NO}_3^-$ , e também diminuição da concentração do  $\text{NH}_4^+$ , provavelmente devido a desnitrificação, haja vista que ocorreu aumento no teor de água, ocasionado após a 2ª irrigação (Figura 19).

Esse aumento no teor de água não ficou tão evidente nos perfis de umidade porque eles apresentam as umidades 10 dias após a irrigação (Figura 19). Portanto, além da mineralização e nitrificação, a desnitrificação tem papel fundamental em situações onde se trabalha com altos teores de água no solo, mesmo que temporário, como é o caso da irrigação.

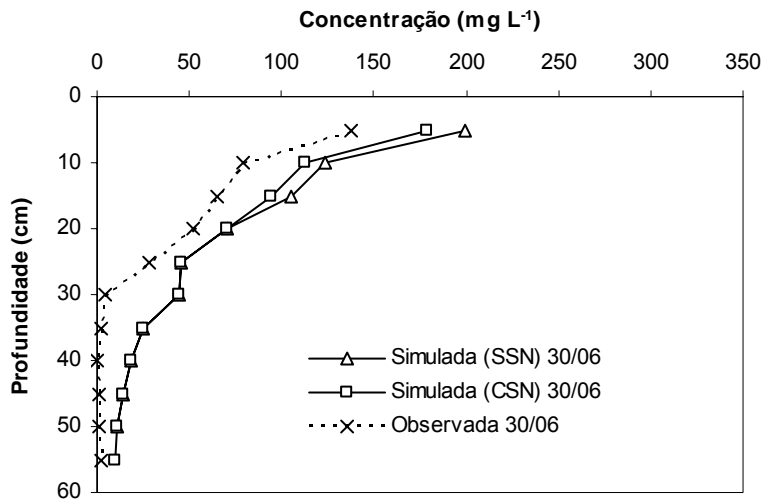
As simulações considerando o termo fonte de N (CFN) ou sumidouro de N (CSN) (Figuras 22a e 22b) superestimaram a concentração de  $\text{NO}_3^-$  e subestimaram a concentração de  $\text{NH}_4^+$  até a profundidade de 20 cm.

As concentrações simuladas de  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$  em 30/6 (Figura 23) apresentaram maiores erros em relação as em 10/6 e 20/6, sendo a de  $\text{NO}_3^-$  superestimada e a de  $\text{NH}_4^+$  subestimada. Observou-se também baixa eficiência do modelo (Tabela 18).

As simulações considerando termo fonte ou sumidouro de N (Figura 23a e 23b) não apresentaram boas estimativas das concentrações de  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$ , mostrando que, em parte, as funções ajustadas não foram eficientes em descrever o comportamento do nitrogênio. Isto porque as reações envolvendo o nitrogênio no solo são bastante dinâmicas, dificultando descrever seu comportamento em termos matemáticos. Além disso, as equações que consideram o termo fonte ou sumidouro de N, são válidas para faixas de temperatura e umidade do solo, embora elas tenham sido ajustas para um único valor de temperatura e umidade (Tabelas 10 a 13).



(a)



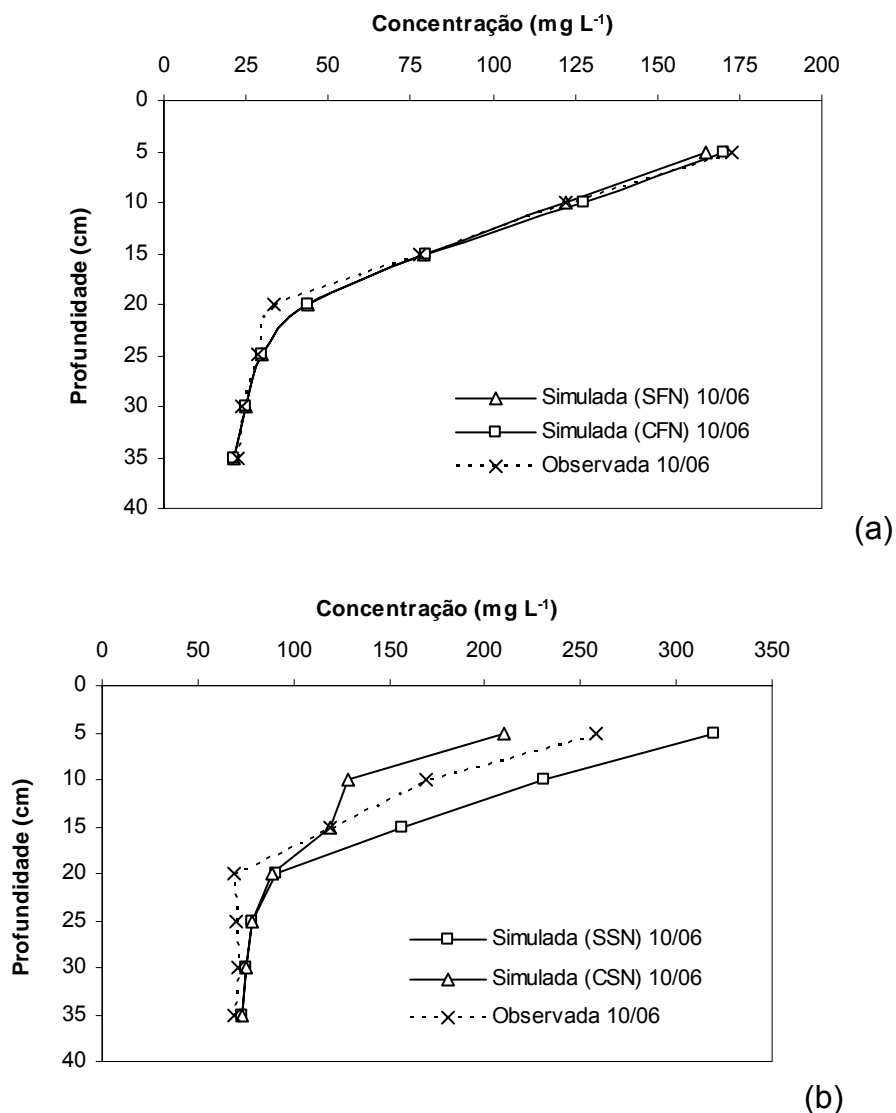
(b)

**Figura 23**– Perfis de concentração de  $\text{NO}_3^-$  (a) e  $\text{NH}_4^+$  (b) em solo arenoso, observados experimentalmente e simulados pelo Modelo SIMASS-C, sem fonte de N (SFN) e com fonte de N (CFN), para o  $\text{NO}_3^-$ , e sem sumidouro N (SSN) e com sumidouro de N (CSN), para o  $\text{NH}_4^+$ , 10 dias após aplicação da 2ª lâmina de irrigação (30/6).

#### 4.6.2. Simulação da distribuição de nitrato e amônio para o solo argiloso

Nas Figuras 24a e 24b estão apresentados os perfis de concentração do  $\text{NO}_3^-$  e  $\text{NH}_4^+$ , respectivamente, observados experimentalmente e simulados utilizando-se o Modelo SIMASS-C, sem fonte de nitrogênio (SFN) e com fonte de

nitrogênio (CFN), para o  $\text{NO}_3^-$ , e sem sumidouro nitrogênio (SSN) e com sumidouro de nitrogênio (CSN), para o  $\text{NH}_4^+$ , em 10/6, ou seja, 7 dias após o início do experimento. Nesta situação, a condição de contorno é evaporação na superfície com fluxo zero na base.



**Figura 24**– Perfis de concentração de  $\text{NO}_3^-$  (a) e  $\text{NH}_4^+$  (b) em solo argiloso, observados experimentalmente e simulados pelo Modelo SIMASS-C, sem fonte de N (SFN) e com fonte de N (CFN), para o  $\text{NO}_3^-$ , e sem sumidouro N (SSN) e com sumidouro de N (CSN), para o  $\text{NH}_4^+$ , em 10/6/2004.

Analisando-se a Figura 24 junto com a Tabela 19 nota-se que a concentração de  $\text{NO}_3^-$  foi subestimada e a de  $\text{NH}_4^+$  superestimada ( $\text{CRM}=0,24$ ) pelo modelo nas simulações em 10/6. A eficiência (EF) na estimativa dos dois íons se mostrou bastante satisfatória.

**Tabela 19-** Coeficientes estatísticos RQMR, CRM, EF e ER usados para avaliar o modelo SIMASS\_C quanto à distribuição de nitrato e amônio no perfil do solo argiloso, nas três épocas analisadas.

Íon	Data	RQMR*	CRM*	EF*	ER*
Nitrato	10/6	4,40	-0,01	0,99	10,32
	20/6	35,52	-0,25	0,65	65,57
	30/6	41,20	-0,09	0,69	67,71
Amônio	10/6	43,99	0,24	0,79	88,46
	20/6	16,60	-0,10	0,97	29,91
	30/6	57,93	-0,61	0,52	98,27

\* Valores ideais: RQMR=0; CRM=0; EF=1 e ER=0.

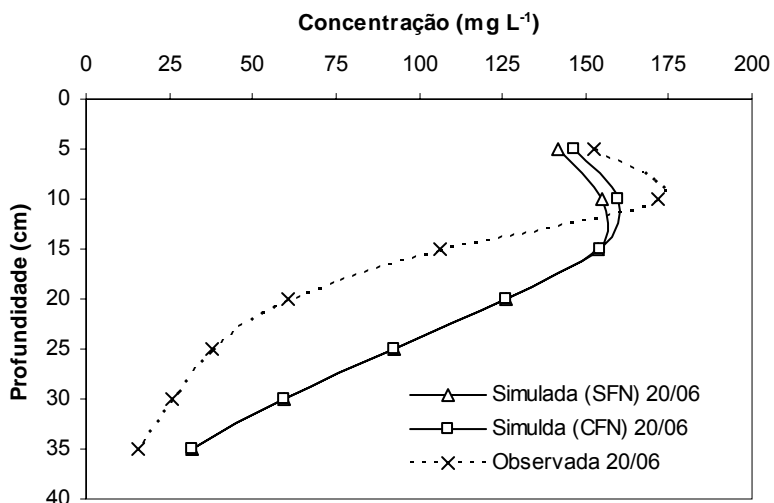
Quando as simulações envolviam o termo fonte ou sumidouro de N, houve subestimativa das concentrações de  $\text{NH}_4^+$  e  $\text{NO}_3^-$ , com menores erros para este último, nos perfis referentes às simulações de 10/06 (Figura 24).

Deve ser salientado que os parâmetros da equação de transporte de solutos, como o coeficiente de partição ( $K_d$ ), a dispersividade ( $\lambda$ ) e o coeficiente de dispersão hidrodinâmica (D) foram obtidos em solo saturado, mas as simulações procederam-se em solos não saturados, estando aí uma possível fonte de erro nos parâmetros de entrada usados nas simulações com o SIMASS\_C.

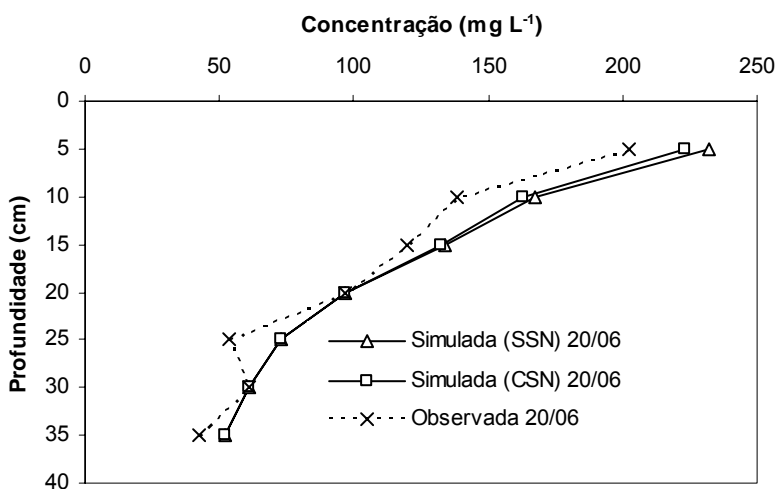
MARAQA et al. (1997), estudaram o efeito do teor de água no transporte de solutos. Observaram que em meios não-saturados ocorreu maior variação da velocidade de avanço e menor espalhamento (mistura) do soluto em relação ao meio poroso saturado.

Entre a simulação de 10/6 (Figura 24a) e a de 20/6 (Figura 25a) houve deslocamento da solução de  $\text{NO}_3^-$  em profundidade, como conseqüência da

aplicação de uma irrigação de 32,1 mm, havendo um pico de concentração em torno de 10 cm de profundidade do solo.



(a)



(b)

**Figura 25**– Perfis de concentração de  $\text{NO}_3^-$  (a) e  $\text{NH}_4^+$  (b) em solo argiloso, observados experimentalmente e simulados pelo Modelo SIMASS-C, sem fonte de N (SFN) e com fonte de N (CFN), para o  $\text{NO}_3^-$ , e sem sumidouro N (SSN) e com sumidouro de N (CSN), para o  $\text{NH}_4^+$ , 10 dias após aplicação da 1ª lâmina de irrigação (20/6).

O teor de água inicial do solo, dado pelas condições iniciais, também assumiu valor papel importante no transporte de  $\text{NO}_3^-$ . Embora, ele tenha sido maior no solo argiloso em comparação que no arenoso, ocorreu maior lixiviação

do nitrato no solo arenoso. Tal comportamento pode estar relacionado a menor capacidade de retenção de água e ao menor fator de retardamento do solo arenoso.

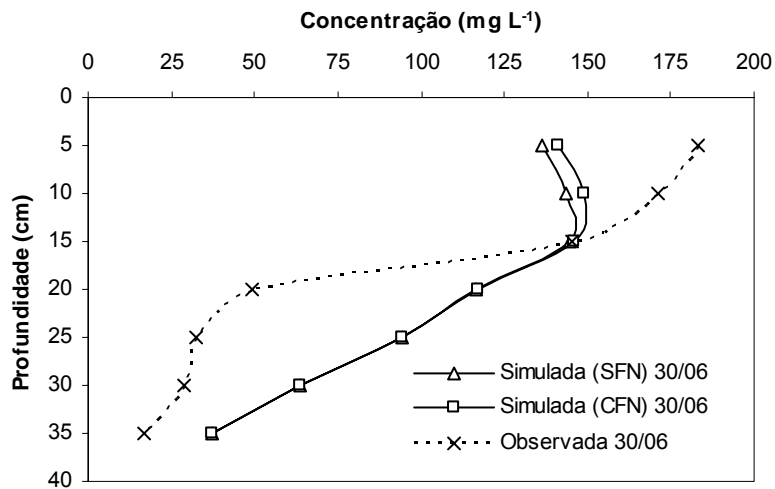
As simulações em 20/6 e 30/6 (Tabela 19) evidenciaram subestimativa das concentrações, de  $\text{NO}_3^-$  e de  $\text{NH}_4^+$ . Nesse período, o amônio simulado em 20/6 menores erros (RQMR e ER) e EF próximo de 1.

Entre os perfis de concentração de  $\text{NH}_4^+$  observados no dia 20/6 (Figura 25b) e 30/6 (Figura 26b) houve grande redução na concentração de amônio após a 2ª irrigação. Esses resultados comprovam o grande efeito das reações biológicas sofridas pelo nitrogênio durante seu transporte no solo.

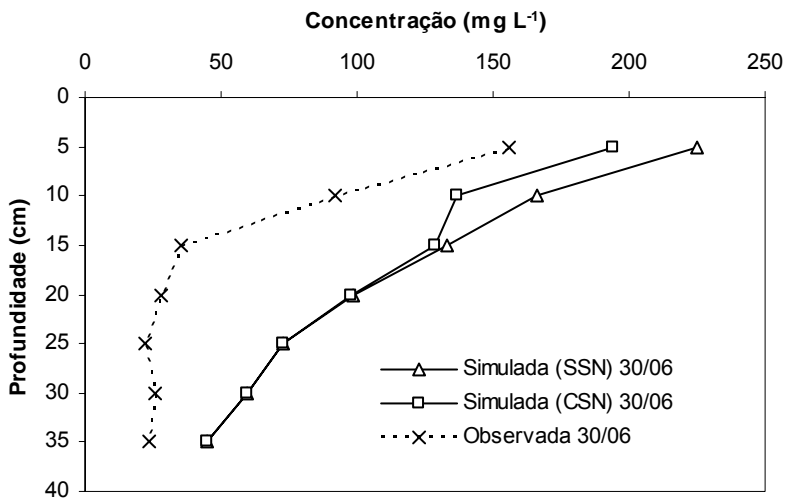
Houve nitrificação do  $\text{NH}_4^+$  (Figura 26b) e também desnitrificação, pois não houve acúmulo de  $\text{NO}_3^-$  em profundidade no mesmo período (Figura 26a). Além disso, o conteúdo de água próximo à base da coluna se encontrava próximo à umidade de saturação (Figura 20), condição favorável à atuação de bactérias desnitrificantes.

Os resultados dos perfis observados mostraram um ligeiro aumento de  $\text{NO}_3^-$  entre 20/6 (Figura 25a) e 30/6 (Figura 26a), próximo à superfície, como consequência da redução do amônio (Figuras 25b e 26b).

Na Figura 26b está apresentado o perfil de concentração de  $\text{NH}_4^+$  após a aplicação de uma lâmina de água de 22,3 mm (2ª irrigação). Analisando o perfil de concentração contido nesta figura, fica comprovado a alta taxa de conversão de  $\text{NH}_4^+$  para  $\text{NO}_3^-$ , devido ao processo de nitrificação e à ineficiência do programa em prever essas perdas (dadas pelo perfil CSN). Essa baixa eficiência é indicada pelo EF (Tabela 19). Logo, o efeito de nitrificação foi mais acentuado do que a movimentação de amônio no solo, pois não houve acúmulo de  $\text{NH}_4^+$  em profundidade. Isto ocorreu porque as bactérias responsáveis pela nitrificação utilizaram o  $\text{NH}_4^+$  como substrato (alimento). Pode-se inferir que possa ter ocorrido, também, algum efeito de desnitrificação, principalmente na base da coluna onde o teor de água do solo na coluna se encontrava próximo à saturação, pois houve redução de  $\text{NO}_3^-$  entre 20/6 (Figura 25a) e 30/6 (Figura 26a), mesmo com grande transformação de  $\text{NH}_4^+$  em  $\text{NO}_3^-$  (Figura 26b).



(a)



(b)

**Figura 26**– Perfis de concentração de  $\text{NO}_3^-$  (a) e  $\text{NH}_4^+$  (b) em solo argiloso, observados experimentalmente e simulados pelo Modelo SIMASS-C, sem fonte de N (SFN) e com fonte de N (CFN), para o  $\text{NO}_3^-$ , e sem sumidouro N (SSN) e com sumidouro de N (CSN), para o  $\text{NH}_4^+$ , 10 dias após aplicação da 2ª lâmina de irrigação (30/6).

## 5. RESUMO E CONCLUSÕES

A preocupação com a questão ambiental tem sido observada em vários países, especialmente com uso de fertilizantes nitrogenados na agricultura. A compreensão dos processos de transformações biológicas do nitrogênio (mineralização e nitrificação), de forma conjunta, é fundamental para o entendimento da dinâmica do nitrogênio no solo, não só do ponto de vista da fisiologia da planta e fertilidade do solo, mas também do ponto de vista ambiental.

Neste sentido, o desenvolvimento de modelos matemáticos, capazes de prever a variação espacial e temporal da concentração das formas de nitrogênio nas camadas do solo, além de fornecer subsídios para a elaboração de estratégias de manejo da adubação e para o controle da poluição e a preservação do meio ambiente.

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um modelo de mineralização da matéria orgânica e de nitrificação do amônio e incorporá-lo ao modelo transporte de solutos no solo (SIMASS\_C), e simular as concentrações e a distribuição de nitrato e amônio nas camadas do solo, em função da temperatura e do teor de água do solo.

A pesquisa foi conduzida em duas etapas. A primeira etapa constou da formulação matemática e elaboração da rotina computacional do modelo, em linguagem Delphi 7.0. Na segunda etapa, foi conduzido um experimento em câmaras de incubação, na qual amostras de dois solos foram incubadas ao longo do tempo para, posteriormente, parametrizar os modelos de mineralização e

nitrificação. Outro experimento, em colunas de solo, foi realizado para testar o modelo de transporte de água e solutos no solo.

Os resultados obtidos pelas simulações da concentração de nitrato e amônio nas colunas, nos dois solos, bem como o perfil de umidade e temperatura do solo, permitiram chegar às seguintes conclusões:

- O modelo exponencial apresentou bom ajuste aos dados experimentais, tanto para a mineralização quanto para a nitrificação;
- No solo argiloso a redução da concentração de  $\text{NH}_4^+$  no solo, o teor de água teve maior influência que a temperatura; no solo arenoso, ocorreu o inverso;
- A temperatura teve maior influência no processo de nitrificação do que o teor de água dos solos;
- Utilizando-se o modelo foi possível prever a tendência do movimento vertical do nitrato e amônio bem como a distribuição do perfil de umidade em colunas de solo não saturado;
- A inclusão do processo de mineralização e nitrificação no modelo SIMASS\_C resultou em melhoria na estimativa da concentração de nitrato e amônio no solo;
- a estratificação do solo causou maiores erros no perfil de umidade do solo;
- A temperatura do solo foi estimada com boa precisão utilizando-se o modelo analítico.

## 6. RECOMENDAÇÕES

Como sugestão para trabalhos futuros fica:

- Testar novos modelos de mineralização da matéria orgânica e de nitrificação do amônio, bem como acrescentar outros processos biológicos, como a desnitrificação, principalmente quando se trabalha com irrigação;
- Buscar construir modelos mecanísticos que descrevam as reações envolvendo o nitrogênio no solo, ao invés de usar modelos empíricos, bastante simplificado e restritos;
- Implementar um modelo temperatura do solo com resolução numérica, que considera o fluxo de calor em perfil heterogêneo e permitindo simular vários cenários;
- Testar o modelo de transporte de água e solutos em condições reais de campo;
- Usar métodos que permitam determinar os parâmetros de entrada D e R em condições não-saturadas.

## 7- REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADDISCOTT, T. M. Kinetics and temperature relationships of mineralization and nitrification in Rothamsted soils with different histories. **Journal of Soil Science**, v. 34, p.343-353, 1983.

ADDISCOTT, T. M. Measuring and modelling nitrogen leaching: parallel problems. **Plant and soil**, v.181, p.1-6, 1996.

AZEVEDO, A.S.; KANWAR, R.S.; SINGH, P.; PEREIRA, L.S. Movement of  $\text{NO}_3^-$  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.

BAILEY, G. W.; WHITE, J. L. Factors influencing the adsorption, desorption and movement of pesticides in soil. **Residue Reviews**, v.32, p.29-92, 1970.

BARROS, F. M. **Parametrização de modelos de mineralização do nitrogênio orgânico em solo tratado com água residuária da suinocultura**. Viçosa, UFV, 2005.71p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola).

BEAR, J. **Hydraulics of groundwater**. New York: McGraw-Hill Book Company. 1979. 569p.

BEDIENT, P. B., RIFAI, H. S., NEWELL, C. J. **Ground Water Contamination: Transport and Remediation**. Prentice-Hall PTR, New Jersey. 1994. 164p.

BORGES JR, J. C.; FERREIRA, P. A. F. DISP - Programa para o cálculo de coeficientes de dispersão e difusão e fator de retardamento, versão 1.1, 2004. (não-publicado).

BROOKS, R. H.; COREY, A. T. **Hydraulic properties of porous media**, Hydrol. Pap. 3, Colorado State Univ, Fort Collins, 1964.

CAMARGO, F. A. O., GIANELLO, C., TEDESCO, M. J. VIDOR, C. Nitrogênio orgânico do solo. In: SANTOS, G. A., CAMARGO, F. A. O., eds. **Fundamentos da**

**matéria orgânica do solo: ecossistemas tropicais e subtropicais.** Porto Alegre, Gênese, 1999. p.117-138.

CAMPBELL, C.A.; BIEDERBECK, V.O. Changes in mineral N and numbers of bacteria and actinomycetes during two years under wheat-fallow in Southwestern Saskatchewan. **Canadian Journal of Soil Science**, v.62, p.125-137, 1982.

CERETTA, C.A.; FRIES, M.R. Adubação nitrogenada no sistema plantio direto. In: NUERNBERG, N.J., ed. **Conceitos e fundamentos do sistema plantio direto. Lages-SC:** Sociedade Brasileira de Ciência do Solo – Núcleo Regional Sul, 1998. p.111-120.

CHO, C. M. Convective transport of ammonium with nitrification in soil. **Canadian Journal of Soil Science**, v.51, p.339-350, 1971.

COELHO, F. C.; RUIZ, H. A.; FERREIRA, P. A.; FRANÇA, G. E.; ARAÚJO, C. A. S.; DUARTE, M. A. Transporte de amônio em colunas com agregados de um latossolo vermelho distrófico. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v.4, n.3, p.362-367, 2000.

CORRÊA, M. M. **Desenvolvimento e teste de modelo de transporte unidimensional de solutos no solo.** Viçosa, UFV, 2001.104p. Tese (Doutorado 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, UFV, 1998. 153p. Tese (Doutorado em Engenharia Agrícola) - Universidade Federal de Viçosa.

DE BOER W.; KLEIN GUNNEWICK, P. J. A.; VEENHUIS, M.; BOCK, E.; LAANBROEK, H. J. Nitrification at low pH by aggregated chemolithotrophic bacteria. **Applied and Environmental Microbiology**, v. 57, p. 3600-3604, 1991.

DECICO, A. **Condutividade térmica dos solos.** Piracicaba, ESALQ, 1974. 84p. Tese de Livre – Docência.

DOURADO-NETO, D.; NIELSEN, D. R.; HOPMANS, J. W.; REICHARDT, K.; BACCHI, O. O. S. Software to model soil water retention curves (SWRC, version 2.00). **Scientia Agrícola**, Piracicaba, v.57, n.1, p. 191-196, 2000.

EGGINTON, G.M, SMITH, K.A. Nitrous oxide emission from a grassland soil fertilized with slurry and calcium nitrate. **Journal of Soil Science**, v.37, p.59-67, 1986.

ELIAS, E. A. **Modelagem analítica do perfil de temperatura do solo.** Piracicaba, ESALQ, 2004. 67p. Tese (Doutorado em Agronomia).

EMPRESA BRASILEIRA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA. **Manual de métodos de análise de solo**. 2ª ed., Embrapa-CNPS, Rio de Janeiro, 1997. 212p.

FEITOSA, F. A. C., MANOEL FILHO, J. **Hidrogeologia: Conceitos e Aplicações**. CPRM, LABHID-UFPE, 1997. 412p.

FERNANDES, M. S.; ROSSIELLO, R. O. P. Mineral nitrogen in physiology and plant nutrition. **Critical Reviews in Plant Sciences**, v.14, n.2, p.111-148, 1995.

FERREIRA, P.A. **Drenagem de Terras Agrícolas**. Curso de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola. Apostila da Disciplina de ENG-644. UFV, Viçosa. 2002. 188p.

FERREIRA, P.A. **Manejo de água-planta em solos salinos**. Curso de Pós-Graduação em Engenharia Agrícola. Apostila da Disciplina de ENG-744. UFV, Viçosa. 2001. 188p.

FERREIRA, P. A.; RIBEIRO, A. C.; SANTOS, C. R.; HENRIQUES, H. P.; CAIXETA, T. J. Movimento vertical de nitrato, amônio, cloreto e potássio em colunas de solo irrigado. **Revista Ceres**, Viçosa, v.210, v.37, p.152-166, 1990.

FLOWERS, H.; O'CALLAGHAN, J. R. Nitrification in soil incubated with pig slurry or ammonium sulphate. **Soil Biology and Biochemistry**, v. 15, p.337-342, 1983.

GOMES, T. M., SAAD, J. C. C., CRUZ, R. L., DIAS, C. T. S. Avaliação da concentração e distribuição de nitrito, amônio e nitrato provenientes da uréia aplicada via sistema de irrigação por gotejamento. **Scientia Agrícola**, Piracicaba, v.9, p. 73-79, 1998.

GONÇALVES, J. L. M.; CARLYLE, J. C. Modelling the influence of moisture and temperature on net nitrogen mineralization in a forested sandy soil. **Soil Biology and Biochemistry**, v.26, n.11, p.1557-1564, 1994.

HANKS, C. F. H.; W. V. BARTHOLOMEW. Soil temperature estimation by a numerical method. **Soil Science Society of America Proceedings**, v.35, p.665-667, 1971.

HANSEN, S.; H. JENSEN, E.; NIELSEN N.E., SVENDEN, H. **DAISY – Soil Plant Atmosphere System Model**, Miljøstyrelsen, 1990. 276P. Disponível em: <<http://www.dina.kvl.dk/~abraham/Daisy>> Acesso em: 04/02/2003.

HAYATSU, M.; KOSUGE, N. Effects of urea fertilization and liming on nitrification in Cerrados soils (Brazil). **Soil Science and Plant Nutrition**, Tokyo, v.39, p.367-371, 1993.

HAYNES, R. J. Nitrification. In: Kozlowski T.T. **Mineral Nitrogen in the Plant–Soil System**. Academic Press, Orlando, p.127-165, 1986.

HILLEL, D. **Fundamentals of soil physics**. Academic Press, Orlando, 1980. 362p.

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.

HORTON, R.; WIERENGA, P. J.; NIELSEN, D. R. Evaluation of methods for determining the apparent thermal diffusivity of soil near the surface. **Soil Science Society of America Journal**, v.47, p.25-32, 1983.

INDIES, F. W.; SIERRA, J.; MARBAN, L. Nitrogen Mineralization Pattern of an Oxisol of Guadeloupe. **Soil Science Society of America Journal**, v.64, p.2002-2010, 2000.

JÉGOU, D.; HALLAIRE, V.; CLUZEAU, D.; TRÉHEN, P. Characterization of the burrow system of the earthworms *Lumbricus terrestris* and *Aporrectodea giardi* using X-ray computed tomography and image analysis. **Biol. Fertil. Soils**, v.29, p.314-318. 1999.

JOHNSON, A.D., CABRERA, M.L.; McCracken, D.V.; RADCLIFFE, D.E. LEACHN simulations of nitrogen dynamics and water drainage in an ultisol. **Agronomy Journal**, v.91, n.4, p.597-606, July-Aug. 1999.

KEMPER, W. D. Solute Diffusivity. In: KLUTE, K. et al. **Methods of Soil Analysis. Part 1. Physical and Mineralogical Methods**. 2<sup>o</sup> ed., Madison, American Society of Agronomy, 1986. p.1007-1024.

KEMPERS.A. J.; ZWEERS, A. Ammonium determination in soil extracts by the salicylate method. **Commun. in Soil Science Plant Analysis**, New York, v.17, n.7, p.715-723, 1986.

KIRKHAM, D.; POWERS, W. L. **Advanced Soil Physics**. New York, John Wiley-Interscience, 1972. 534p.

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.

LOAGUE, K.; GREEN, R. E. Statistical and graphical methods for evaluating solute transport models: overview and application. Amsterdam, **Journal of contaminant Hydrology**, n.7, p.51-73, 1991.

MACHADO, S. L.; MACHADO, M. F. C. MECÂNICA DOS SOLOS II: Conceitos introdutórios. UFBA, Escola Politécnica, 1997. 166P. Disponível em: <http://www.geotec.eng.ufba.br>. Acesso em: 20 de Set. de 2004.

MARAQA, M. A.; WALLACE, R. B.; VOICE, T. C. Effects of degree of water saturation on dispersivity and immobile water in sandy soil columns. **Journal of Contamination Hydrology**, v.25, p.199-218, 1997.

MASSMAN, W. J. Periodic temperature variations in an inhomogeneous soil: a comparison of approximate and exact analytical expressions. **Soil Science**, v.155, p.331-338. 1993.

MCLAREN, A. D. Steady State studies of nitrification in soil: Theoretical considerations. **Soil Science Society American Proceedings**, v.33, p.273-275, 1969.

MENGEL, K. Dynamics and availability of major nutrients in soils. In: STEWART, B.A. (Ed). **Advances in soil science**, v.2. New York: Springer-Verlag, 1985. p.65-115.

MIRANDA, J. H. **Modelo para simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não-saturado**. Piracicaba, ESALQ, 2001. 79p. (Tese de doutorado).

MISRA, C.; NIELSEN, D. R.; BIGGAR, J. W. Nitrogen transformation in soil during leaching: II Steady State Nitrification and Nitrate Redution. **Soil Science Society American Proceedings**, v.38, n.2, p.294-299, 1974(a).

MISRA, C.; NIELSEN, D. R.; BIGGAR, J. W. Nitrogen transformation in soil during leaching: III Nitrate Reduction in soil columns. **Soil Science Society American Proceedings**, v.38, n.2, p.300-304, 1974(b).

MISRA, C.; NIELSEN, D. R.; BIGGAR, J. W. Nitrogen transformations in soil during leaching, I. Theoretical considerations. **Soil Science Society of American Proceedings**, Madison, v.38, p.289-293, 1974(c).

MOREIRA, F. M. S.; SIQUEIRA, J. O. **Microbiologia e Bioquímica do solo**. Lavras: Editora UFLA, 2002, 626p.

MOROIZUMI, T.; HORINO, H. The effects of tillage on soil temperature and soil water. **Soil Science**, v.167, p.548-559. 2002.

NEVES, M. C. P. Como os microrganismos do solo obtêm energia e nutrientes. In: CARDOSO, E. J. B. N.; TSAI, S. M.; NEVES, M. C. Microbiologia do solo. Campinas, p.17-31. 1992.

NEVES, R.; CHAMBEL-LEITÃO, P.; LEITÃO, P. C. Modelação numérica da circulação da água no solo: O Modelo MOHID. **Revista Pedologia Oeiras**, v.28, p.46-55, 2000. <Disponível em: [www.maretec.mohid.com/PublicData/Papers](http://www.maretec.mohid.com/PublicData/Papers)>. Acesso em: 20 de Set. 2004.

NOGUEIRA, F. D., LIMA, L. A., GUIMARÃES, P. T. G. Fertirrigação para o Cafeeiro. **Informe Agropecuário**, Belo Horizonte, v. 19, n. 193, p.82-91. 1998.

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, 2000.

OLIVEIRA, E. M. M. **Fatores de retardamento e coeficientes de dispersão-difusão de fósforo, potássio e nitrogênio em cinco solos de Minas Gerais**. Viçosa: 2001. 56p. Dissertação (Mestrado em Solos e Nutrição de Plantas) - Universidade Federal de Viçosa.

OLIVEIRA, J. R. A.; VILELA, L.; LAYARZA, M. A. Adsorção de nitrato em solos de Cerrado do Distrito Federal. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v.35, n.6, p.1199-1205, 2000b.

PADILLA, I. Y.; YEH, T. C. J.; CONKLIN, M. H. The effect of water content on solute transport in insaturated porous media. **Water Resources Research**, v.35, n.11, p.3303-3313, 1999.

PARAIBA, L. C.; PULINO, P. **Simulação Numérica da Dispersão-Advecção de Pesticidas no Solo sob Efeito da Temperatura**. EMBRAPA-Jaguariúna, Documento 35, 2003. 43p.

PARLANGE, J. Y.; STARR, J. L.; BARRY, D. A.; BRADDOCK, R. D. Theoretical study of the inclusion of dispersion in boundary conditions and transport equations for zero-order kinetics. **Soil Science Society of American Journal**, v.46, p.701-704, 1982.

PARTON, W. J.; LOGAN, J. A. A model for diurnal variation in soil and air temperatura. **Agricultural Meteorology**, v.23, p.205-216. 1981

PAUL, E.A. e CLARK, F.E. **Soil microbiology and biochemistry**. San Diego: Academic press. 1989.

PILOT, L.; PATRICK JR, W. H. Nitrate reduction in soils: Effect of soil moisture tension. **Soil Science**, v.114, n.4, p.312-316, 1972.

PREVEDELLO, C. L. **Física do Solo com Problemas Resolvidos**. Curitiba: Saeafs, 1996. 446p.

PROSSER, J.I., Autotrophic nitrification in bacteria. **Advances in Microbial Physiology**, v.30, p.125-181, 1989.

REGAZZI, A. J. Teste para verificar a igualdade de parâmetros e da identidade de modelos de regressão não-linear. **Revista Ceres**, Viçosa, v.50, p.9-26, 2003.

REICHARDT, K. **Processos de Transferência no Sistema Solo-Planta-Atmosfera**. Piracicaba, ESALQ/USP, Fundação Cargill, 1985, 444p.

REICHARDT, K. Simpósio avançado de química e fertilidade do solo. In: **Dinâmica de íons no solo**. Piracicaba, ESALQ/USP: Fundação Cargill, 1986, 179p.

SCHNEIDER, F. M. **Comportamento e propriedades térmicas do solo de Santa Maria**. 1979, 79p. Dissertação (Mestrado em Agrometeorologia).

SIERRA, J. Nitrogen mineralization and nitrification in a tropical soil: effects of fluctuating temperature conditions. **Soil Biology and Biochemistry**, v.34, p.1219-1226, 2002.

SIERRA, J. Temperature and soil moisture dependence of N mineralization in intact soil cores. **Soil Biology and Biochemistry**, v.29, p.1557-1563, 1997.

SILVA, D. J. **Análise de alimentos: métodos químicos e biológicos**. Viçosa, MG: Imprensa Universitária, 1990. 165p.

SPADOTTO, C. A. **Comportamento e Destino Ambiental de Herbicidas**. Comitê do Meio Ambiente, Sociedade Brasileira da Ciência das Plantas Daninhas. 2003. Disponível em: <<http://www.cnpma.embrapa.br/herbicidas>>. Acesso em 28/05/2003.

STARK J.M.; FIRESTONE, M.K. Mechanisms for soil moisture effects on activity of nitrifying bacteria. **Applied and Environmental Microbiology**, v.61, p.218-221, 1995.

STARR, J. L. Assessing Nitrogen movement in the field. In: Chemical Mobility and reactivity in soil systems. Soil Science Society of America, n.11. Cap.6, p.79-92. 1983.

STATSOFT. Statistica for windows V.5.5 Tulsa: Statsoft, 1996.

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.

STEVENSON, F.J. **Cicles of soil – carbon, nitrogen, phosphorus, sulfur, micronutrients**. John Wiley e Sons, 1986. 380p.

STRONG, D. T.; FILLERY, I. R. P. Denitrification response to nitrate concentrations in sandy soils. **Soil Biology and Biochemistry**, v.24, p.945-954, 2002.

STRONG, D. T.; SALE, P. W. G.; HELYAR, K. R. Initial soil pH affects the pH at which nitrification ceases due to self-induced acidification of microbial microsites. **Australian Journal of Soil Research**, Collingwood, v. 35, n. 3, p. 565-570, 1997.

TISDALE, S.L., NELSON, W.L., BEATON, J.D. **Soil fertility and Fertilizers**. 4ed. New York: Macmillan Publishing Company, 1985. 754p.

TIUNOV, A.V., SCHEU, S. Microbial respiration, biomass, biovolume and nutrient status in burrow walls of *Lumbricus terrestris* L. (Lumbricidae). **Soil Biology and Biochemistry**, v.31, p.2039-2048. 1999.

VALOCCHI, A.J. Describing the transport of ion-exchanging contaminants using an effective Kd approach. **Water Resources Research**, Washington, v.20, p.499-503, 1984.

Van GENUCHTEN, M.T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society American Journal**, Madison, v.44, p.892-898, 1980.

Van GENUCHTEN, M.T.; 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.

Van GENUCHTEN, M. Th., A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society American Journal**, v.44, p.892-898, 1980.

VAZ DA SILVA, L. M.; PASQUAL, A. Dinâmica e modelagem da matéria orgânica do solo com ênfase ao ecossistema tropical. **Energia na Agricultura**, Botucatu, v.14, n.3, p.13-23, 1999.

VICTORIA, R.L., PICCOLO, M.C. & VARGAS, A.A.T. O ciclo do nitrogênio, In: CARDOSO, E.J.B.N., TSAI, S.M., NEVES, M.C.P. **Microbiologia do solo**. Campinas: Sociedade Brasileira de Ciência do Solo, cap. 9, p.105-119, 1992.

VIEIRA, E. O. **Índices de lixiviação e modelagem do transporte de pesticidas no solo**. Viçosa, UFV, 2003. 211p. Tese (Doutorado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Viçosa.

VINTEN, A.J.A. e SMITH, K.A. Nitrogen cycling in agricultural soils. In: BURT, T.P, HEATHWAITE, A.L. e TRUDGILL, S.T, ed. **Nitrate: Processes, patterns and management**. Chichester: John & Sons Ltd, England, 1993. 444p.

WAGENET, R. J.; BIGGAR, J. W.; NIELSEN, D. R. Tracing the transformations of urea fertilizer during leaching. **Soil Science Society American Journal**, v.45, n.5, p.896-902, 1977.

WATTS, D. G.; HANKS, R. J. A soil water Nitrogen Model for irrigated corn on sandy soils. **Soil Science Society American Journal**, v.42, p.492-499, 1978.

WIERENGA, P. J.; WIT, C. T. Simulation of heat transfer in soils. **Soil Science Society American Proceedings**, v.34, p.845-848, 1970.

WOLSCHICK, D. **Modelo SIMASS-C: Inclusão da modelagem do crescimento e desenvolvimento do milho**. Viçosa, UFV, 2005. 140p. Tese (Doutorado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Viçosa.

WONG, M.T.F.; HUGHES, R.; ROWELL, D.L. Retarded leaching of nitrate in acid soils from the tropics: measurement of the effective anion exchange capacity. **Journal of Soil Science**, Oxford, v.41, n.4, p.655-663, 1990.

WU, J.; NOFZIGER, D. L. Incorporating temperature effects on pesticide degradation into a management model. **Journal Environment Quality**, v.28, p.92-100, 1999.

XEVI, E.; GILLEY, J.; FEYEN, J. Comparative study of two crop yield simulation models. **Agricultural Water Management**, v.30, p.155-173, 1996.

YANG, J. E.; SKOGLEY, E. O.; SCHAFF, B. E.; KIM, J. J. A simple Spectrophotometric determination of nitrate in water, resin and soil extracts. **Soil Science Society American Journal**, v.62, p.1108-1115, 1998.

YEOMANS, J. C.; BREMNER, J. M. A rapid and precise method for routine determination of carbon in soil. **Comm. Soil Science Plant Analyses**, v.19, p.1467-1476, 1988.

ZACHARIAS, S.; HEATWOLE, C. D.; COAKLEY, C. W. Robust quantitative techniques for validating pesticide transport models. **Transaction of the ASAE**, v.39, n. 1, p.47-54, 1996.