

EDSON DE OLIVEIRA VIEIRA

**ÍNDICES DE LIXIVIAÇÃO E MODELAGEM DO TRANSPORTE DE
PESTICIDAS 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

2003

EDSON DE OLIVEIRA VIEIRA

**ÍNDICES DE LIXIVIAÇÃO E MODELAGEM DO TRANSPORTE DE
PESTICIDAS 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 setembro de 2003.

Dr. Helio Teixeira Prates
(Conselheiro)

Prof. Antonio Teixeira de Matos
(Conselheiro)

Prof. Paulo Afonso Ferreira

Prof. Demétrius David da Silva

Prof. Mauro Aparecido Martinez
(Orientador)

Aos meus pais e irmãos.

À minha esposa Cidinha, pelos momentos em que sempre permaneceu a meu lado.

Aos meus filhos Matheus, Pedro e Davi motivo maior de minha busca constante pelas vitórias e conquistas objetivando um futuro digno, justo e honrado.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus, pela eterna presença que sempre auxiliou-me e ainda auxilia-me a superar obstáculos e enfrentar a caminhada do dia-a-dia com paz e perseverança.

À minha esposa e filhos, por terem compreendido os momentos em que não pude estar junto deles, durante toda essa jornada.

Ao Professor Mauro Aparecido Martinez pelas orientações, suas valiosas sugestões, sua compreensão e amizade.

À Universidade Federal de Minas Gerais, pela permissão de meu afastamento para realização deste curso, exatamente nos anos da implantação do curso de Agronomia em Montes Claros, MG.

À Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária - Centro Nacional de Pesquisa de Milho e Sorgo (EMBRAPA - Milho e Sorgo), pela estrutura e pelos recursos que possibilitaram a execução deste trabalho.

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

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) Capes, pelo suporte financeiro por meio da concessão da bolsa de estudos do Programa Institucional de Capacitação Docente e Técnica (PICDT).

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo suporte financeiro parcial para o desenvolvimento desta pesquisa.

Aos Conselheiros Hélio Teixeira Prates e Antonio Teixeira de Matos, pelas indispensáveis críticas e sugestões.

Ao Chicão e ao seu Antônio do laboratório de Hidráulica da UFV e ao Gil e Luciano, pela implantação e condução do experimento em campo, o qual, sem a ajuda, seria impossível.

Aos amigos Carlos e Janaína, do Laboratório de Agroquímica da Embrapa, Milho e Sorgo, que contribuíram, em muito, na condução das análises de resíduo.

Aos amigos da pós-graduação Ricardo, Papagaio, Sólon, Patrícia, Ana Augusta, Geraldo Magela, Adilson, Camboim, Salomão, Gessionei, pela amizade, pelo apoio e pelo companheirismo durante todo o curso.

Aos Amigos, Orlando e Rita, Marcos e Érica, Zé Henrique e Silvana, Simone e tia Walcília, Ronaldo e Eliane, Waldir e Ana Maria e a todos os seus filhos, que sempre me lembraram que existe vida além da pós-graduação.

Aos estagiários da graduação, Fernando e Franklin, pela contribuição nos momentos decisivos do experimento em campo.

Aos professores e funcionários do DEA, UFV, pela amizade e pelo apoio.

Enfim, a todos aqueles que contribuíram direta ou indiretamente nos maus e bons momentos durante todo o curso de pós-graduação.

BIOGRAFIA

Edson de Oliveira Vieira, filho de Gesner Henriques de Araújo Vieira e Maria Nilce de Oliveira Vieira, nasceu em Belo Horizonte, MG, em 28 de abril de 1967.

Em março de 1986, iniciou o curso técnico em Hidrologia no Instituto de Pesquisas Hidráulicas da UFRS, Porto Alegre, RS, concluindo-o em dezembro do mesmo ano.

Em janeiro de 1987, foi contratado pelo Centro Tecnológico de Minas Gerais (CETEC), onde desenvolveu trabalhos de regionalização de vazões mínimas de diversos rios dos Estados de Minas Gerais e Goiás até janeiro de 1988.

Em fevereiro de 1988, iniciou o curso de Engenharia Agrônômica, na Universidade Federal de Viçosa, concluindo-o em dezembro de 1992.

Em fevereiro de 1993, iniciou o curso de mestrado em Engenharia Agrícola, concentração em Irrigação e Drenagem, na Universidade Federal de Viçosa, em Viçosa, MG, concluindo-o em fevereiro de 1996.

Em março 1996 foi contratado como Engenheiro de Sistema Hidroagrícolas na CEPRAM (Centro de Planejamento Rural e Ambiental) em Montes Claros- MG

Em abril de 1998 foi efetivado como Professor Assistente do curso de Agronomia do Núcleo de Ciências Agrárias da UFMG em Montes Claros, onde leciona as disciplinas de Hidráulica agrícola, Irrigação e Drenagem e Hidrologia.

Em agosto de 1999, integrou-se no programa de Doutorado em Engenharia Agrícola, concentração em Recursos Hídricos e Ambientais, na Universidade Federal de Viçosa, em Viçosa, MG, concluindo-o em setembro de 2003.

ÍNDICE

LISTA DE SIMBOLOS.....	xi
LISTA DE FIGURAS	xvi
LISTAS DE TABELAS	xx
RESUMO	xxii
ABSTRACT	xxiv
INTRODUÇÃO GERAL.....	1
CAPÍTULO 1.....	3
MODELO COMPUTACIONAL PARA CÁLCULO DO ÍNDICE DE LIXIVIAÇÃO E AVALIAÇÃO DO RISCO DE CONTAMINAÇÃO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS	3
1.1. INTRODUÇÃO	4
1.2. REVISÃO DE LITERATURA	7
1.2.2. Aspectos gerais da contaminação das águas subterrâneas.....	9
1.2.3. Fatores relacionados à contaminação das águas subterrâneas por pesticidas	10
1.2.4. Avaliação da vulnerabilidade de contaminação de águas subterrâneas... 	11
1.2.4.1. Índices de lixiviação	11
1.3. MATERIAL E MÉTODOS.....	15
1.3.1. Modelo matemático do Índice de Lixiviação (Li).....	15
1.3.2. Balanço Hídrico	24
1.3.3. Parâmetros do modelo computacional do índice de lixiviação	25
1.3.4. Caracterização do cenário do estudo de caso	26

1.3.5. Associação do índice de lixiviação com sistema de informação geográfica (SIG)	27
1.4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	29
1.4.1. Programa desenvolvido	29
1.4.2. Estudo de caso	33
1.5. RESUMO E CONCLUSÕES	44
1.6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	46
CAPÍTULO 2.....	51
MODELGEM DO TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL DE ÁGUA E SOLUTOS NO SOLO	51
2.1. INTRODUÇÃO	52
2.2. REVISÃO DE LITERATURA	55
2.2.1. Movimento da água no solo.....	55
2.2.1.1. Condutividade hidráulica do solo.....	56
2.2.1.3. A equação de Darcy-Buckingham	58
2.2.1.4. Capacidade Hídrica Específica	60
2.2.1.5. Determinação da condutividade hidráulica e da capacidade hídrica específica em solos não saturados	62
2.2.2. Transporte de solutos no solo.....	65
2.2.2.1. Transporte convectivo de solutos no solo.....	65
2.2.2.2. Transporte de solutos por difusão	66
2.2.2.3. Transporte de solutos por dispersão	68
2.2.2.4. Coeficiente de dispersão hidrodinâmica	70
2.2.2.5. Transporte convectivo e dispersivo de solutos no solo.....	71
2.2.3 - Isotermas de sorção	73
2.2.4. Absorção de água e solutos pelas plantas.....	76
2.2.5. Degradação	78
2.3. MATERIAL E MÉTODOS.....	80
2.3.1. Desenvolvimento do modelo	80
2.3.1.1. Concepção física do modelo	80
2.3.1.2. Equação do movimento de água no solo	81
2.3.1.2.2. Refinamento para a solução numérica da equação do movimento de água no solo.....	88
2.3.1.3. Modelos para simulação da curva de retenção de umidade no solo.....	92

2.3.1.4. Extração de água pelas plantas.....	92
2.3.1.4.1. Estimativa da transpiração	93
2.3.1.4.2. Densidade do sistema radicular	96
2.3.1.4.3. Fator empírico da equação de extração de água.....	97
2.3.1.5. Transporte de solutos no solo.....	98
2.3.1.6. Extração de soluto pelas plantas.....	103
2.3.1.7. Degradação do pesticida em solução no solo	104
2.3.1.8. Fluxograma do aplicativo.....	104
2.3.2 – Experimento de campo	106
2.3.2.1 – Caracterização da área experimental.....	107
2.3.2.2. Caracterização química e granulométrica.....	107
2.3.2.3. Caracterização físico-hídrica do solo	108
2.3.2.4. Parâmetros de transporte do Carbofuran no solo	114
2.3.3.4.2. Extração e análise do resíduo de carbofuran em amostras de solo ...	115
2.3.3.4.3. Determinação dos parâmetros de transporte do Carbofuran no solo	117
2.3.4. Montagem do ensaio de campo para teste do modelo.....	118
2.3.4.1. Lâminas aplicadas.....	119
2.3.4.2. Diferenciação das parcelas	122
2.3.4. Teste do modelo.....	124
2.4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	125
2.4.1. Análise dos dados experimentais da concentração do Carbofuran no escoamento superficial.....	125
2.4.2. Análise dos dados experimentais de distribuição de umidade e Carbofuran no perfil do solo	129
2.4.3. Modelo HIDROSOLO	135
2.4.4. Avaliação do modelo HIDROSOLO	147
2.4.4.1. Movimento de água no perfil do solo	147
2.4.4.2. Transporte do Carbofuran no perfil do solo	157
2.5. RESUMO E CONCLUSÕES.....	169
2.6. RECOMENDAÇÕES FINAIS.....	171
2.7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	172
APÊNDICES.....	179
APÊNDICE 1.....	180

APÊNDICE 2	181
APÊNDICE 3	182
APÊNDICE 4	183
APÊNDICE 5	184
APÊNDICE 6	185

LISTA DE SIMBOLOS

v	= velocidade média da água nos poros da zona vadosa	$L T^{-1}$
f	= fugacidade	$M L^{-1} T^{-2}$
\bar{V}	= velocidade média intrínseca	$L^3 L^{-3}$
λ	= coeficiente de degradação de primeira ordem	T^{-1}
ε	= porosidade do solo	ads
ε_a	= porosidade preenchida com ar quando solo está na capacidade de campo	ads
θ	= teor de água no solo em base volume	$L^3 L^{-3}$
θ_{cc}	= teor de água no solo na capacidade de campo em base volume	$L^3 L^{-3}$
θ_s	= teor de água no solo na saturação em base volume	$L^3 L^{-3}$
θ_r	= teor residual de água no solo em base volume	$L^3 L^{-3}$
ρ	= massa específica da água	$M L^{-3}$
μ	= viscosidade dinâmica do fluido	$M L^{-1} T^{-1}$
λ	= Índice de distribuição de tamanho de poros	ads
ξ	= fator de tortuosidade	ads
δ	= dispersividade do meio poroso	L
Γ	= extração de soluto do solo pelas plantas	$M L^{-3} T^{-1}$
Ψ	= decaimento molecular do pesticida	T^{-1}
κ	= constante empírica da equação de extração de soluto	ads
ϑ	= constante empírica.	ads
α, n_{vg}	= parâmetros de ajustes do modelo de van Genuchten	ads

∇H	= gradiente hidráulico	$L L^{-1}$
ρ_p	= massa específica das partículas do solo	$M L^{-3}$
ρ_s	= massa específica do solo	$M L^{-3}$
η	= coeficiente de degradação	T^{-1}
A	= área da superfície onde foi aplicado o pesticida	L^2
AF	= Fator de atenuação	ads
AFE	= área foliar específica	$L^2 M$
A_{rm}	= armazenamento de água no solo	$L T^{-1}$
B_A	= coeficiente de transferência de massa	$L T^{-1}$
B_{ag}	= difusividade molecular em água	$L^2 T^{-1}$
B_{ea}	= difusividade efetiva do pesticida no ar	$L^2 T^{-1}$
B_{ew}	= coeficiente de transferência de massa em água	$L^2 T^{-1}$
B_W	= difusividade molecular de compostos químicos no ar	$L^2 T^{-1}$
C	= concentração do pesticida em solução	$M L^{-3}$
C_0	= concentração da solução que entra no solo	$M L^{-3}$
C_a	= concentração em um ponto fictício fora da região de estudo	$M L^{-3}$
C_{Dia}	= Duração do dia	T
C_m	= taxa de crescimento absoluto da cultura	$M L^{-2} T^{-1}$
CTA	= capacidade total de água no solo	L
d	= profundidade do solo	L
$D(\theta)$	= difusividade da água no solo	$M^2 L^{-1}$
Da	= parâmetro de reação à difusão do pesticida no ar	$L T$
D_{Deg}	= parâmetro de reação de degradação	$L T$
D_E	= parâmetro de reação à difusão do ar da camada limite	$L T$
D_h	= coeficiente de dispersão mecânica	$L^2 T^{-1}$
D_{Lix}	= parâmetro de reação de lixiviação	$L T$
D_m	= coeficiente de difusão molecular na solução do solo	$L^2 T^{-1}$
D_o	= coeficiente de difusão de soluto em água pura	$L^2 T^{-1}$
d_p	= diâmetro médio das partículas do solo	L
D_{rad}	= densidade do sistema radicular	$M L^{-3}$
D_{Vol}	= parâmetro de difusão para a volatilização	$L T$
D_W	= parâmetro de difusão do pesticida na fase aquosa do solo	$L T$
$E(h)$	= capacidade hídrica específica	L^{-1}

E_c	= Eficiência de crescimento	ads
ED	= estágio de desenvolvimento da cultura	ads
E_f	= eficiência fotoquímica	$M L^{-2} T^{-1}$
E_p	= evaporação diária do solo	$L T^{-1}$
ET	= evapotranspiração diária da cultura	$L T^{-1}$
ET_o	= evapotranspiração potencial de referência	$L T^{-1}$
ET_p	= evapotranspiração potencial da cultura	$L T^{-1}$
ET_r	= evapotranspiração real da cultura	$L T^{-1}$
E_v	= evaporação da superfície do solo	$L T^{-1}$
F	= fator empírico	ads
F_{Bruta}	= fotossíntese bruta do dossel da cultura	$M L^{-2} T^{-1}$
F_f	= fator de fluidez	$L T^{-1}$
F_{max}	= fotossíntese máxima realizada	$M L^{-2} T^{-1}$
f_{oc}	= fração de carbono orgânico do solo	ads
g	= aceleração da gravidade	$L T^{-2}$
GD	= graus-dias acumulados	$^{\circ}C$
GDF	= graus-dias acumulados para atingir o florescimento	$^{\circ}C$
GDM	= graus-dias acumulados para atingir a maturação	$^{\circ}C$
GUS	= índice GUS de lixiviação	ads
H	= potencial total da água no solo	L
h_b	= potencial matricial de entrada de ar	L
I	= irrigação	L
IAF	= índice de área foliar	$L^3 L^{-3}$
J	= fluxo combinado	$M L^{-2} T^{-1}$
J_c	= fluxo convectivo	$M L^{-2} T^{-1}$
J_d	= fluxo difusivo	$M L^{-2} T^{-1}$
J_h	= fluxo dispersivo	$M L^{-2} T^{-1}$
$J_{L(0)}$	= fluxo inicial de um composto lixiviado da superfície do solo	$M L^{-2} T^{-1}$
$J_{L(t)}$	= fluxo do composto lixiviado	$M L^{-2} T^{-1}$
$K(\theta)$	= condutividade hidráulica em função do teor de água do solo	$L T^{-1}$
$K(h)$	= condutividade hidráulica em função potencial matricial (h)	$L T^{-1}$
K_c	= coeficiente da cultura	ads
K_d	= coeficiente de partição	$L^3 M^{-1}$

k_{Deg}	= taxa constante de perda do composto por degradação	T^{-1}
k_{dis}	= taxa constante de perda do composto no solo	T^{-1}
K_e	= coeficiente de extinção	ads
K_H	= constantes de Henry	ads
K_{int}	= permeabilidade intrínseca do solo	L^2
k_{Lix}	= taxa constante de perda do composto por lixiviação	T^{-1}
K_{MM}	= coeficiente de partição água/matéria mineral	$L^3 M^{-1}$
K_O	= condutividade hidráulica do solo saturado	LT^{-1}
K_{oc}	= coeficiente de partição água/carbono orgânico	$L^3 M^{-1}$
K_r	= condutividade hidráulica relativa	LT^{-1}
K_s	= coeficiente de umidade	ads
k_{Vol}	= taxa constante de perda do composto por volatilização	T^{-1}
L	= espessura da coluna do solo	L
L_a	= lâmina atual de água no solo	L
Li	= índice de lixiviação do pesticida no solo	ads
LM_t	= massa total do composto lixiviada da camada do solo no intervalo de tempo Δt por unidade de área	$M L^{-2}$
LPI	= índice de potencial de lixiviação	ads
M	= massa total aplicada	M
m	= coeficiente de transmissividade de luz	ads
M_0	= massa inicial aplicada por unidade de área	$M L^{-2}$
MO	= matéria orgânica do solo	ads
MS	= matéria seca total produzida pela planta	$M L^{-2} T^{-1}$
M_t	= massa do composto que persiste na camada do solo no tempo t por unidade de área	$M L^{-2}$
π	= constante empírica da isoterma linear	ads
Θ	= ordem da reação de degradação;	ads
n_{bc}	= expoente da equação de Brooks-Corey	ads
P_e	= número de Peclet	ads
P_{Folha}	= partição de matéria seca para as folhas	ads
$Prec$	= precipitação	$L T^{-1}$
P_v	= pressão de vapor da substância	$M L^{-1} T^{-2}$
q	= fluxo de água no solo	LT^{-1}
R	= Absorção de água pelas plantas	$L T^{-1}$

Ra	= radiação fotossinteticamente ativa	$M L^{-2} T^{-1}$
RD _m	= profundidade máxima do sistema radicular	L
RD _o	= profundidade de plantio	L
R _{Esc}	= taxa de escoamento superficial	$L T^{-1}$
RF	= fator de retardamento	ads
R _L	= recarga líquida do lençol freático	$L T^{-1}$
S	= concentração adsorvida na fração sólida do solo	$M M^{-1}$
Se(h)	= saturação efetiva	ads
S _{max}	= adsorção máxima do soluto no solo	$M M^{-1}$
S _p	= solubilidade em água	$M L^{-3}$
t	= tempo	T
T	= temperatura	K
t _{1/2}	= meia vida do produto no solo	T
Tie	= taxa de infiltração estável	$L T^{-1}$
t _m	= tempo para atingir a profundidade máxima das raízes	T
T _p	= taxa de transpiração potencial	$L T^{-1}$
t _p	= tempo após o plantio	T
TSFC	= coeficiente empírico de reflexão	ads
V _{ag}	= volume da fração líquida do solo	L ³
V _{ar}	= volume da fração gasosa do solo	L ³
V _{MAX}	= taxa de degradação máxima	$M L^{-3} T^{-1}$
V _{MM}	= volume da fração mineral do solo	L ³
V _{MO}	= volume da fração orgânica do solo	L ³
V _T	= volume total	L ³
x,y,z	= coordenadas espaciais	L
Y	= distância percorrida na difusão	L
Z	= capacidade de fugacidade	$T^2 L^{-2}$
Z _{ag}	= capacidade de fugacidade do compartimento aquoso do solo	$T^2 L^{-2}$
Z _{ar}	= capacidade de fugacidade do compartimento gasoso do solo	$T^2 L^{-2}$
Z _{MM}	= capacidade de fugacidade do compartimento mineral do solo	$T^2 L^{-2}$
Z _{MO}	= capacidade de fugacidade do compartimento orgânico do solo	$T^2 L^{-2}$
Z _T	= capacidade de fugacidade total	$T^2 L^{-2}$

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	– Distribuição das águas na subsuperfície do solo	8
Figura 1.2	– Distrito de irrigação do Gorutuba e a representação dos 14 pontos amostrais georreferenciados	27
Figura 1.3	– Tela principal do modelo HIDROSOLO	29
Figura 1.4	– Formulário de cadastro de pesticidas	29
Figura 1.5	– Formulário de cadastros das propriedades da superfície do solo	30
Figura 1.6	– Formulário de cadastros das propriedades físico-hídricas, químicas, textural e de ajuste da curva de retenção	30
Figura 1.7	– Formulário de cadastro de culturas	31
Figura 1.8	- Formulário de cadastro do clima	31
Figura 1.9	– Formato do arquivo TXT para preenchimento do formulário de ‘Clima’ via importação de dados	33
Figura 1.10	– Escolha do cenário a ser avaliado	34
Figura 1.11	– Escolha a ser feita pelo usuário quanto ao cálculo da recarga do aquífero	34
Figura 1.12	– Formulário onde se obtém o índice de potencial de risco	35
Figura 1.13	– Mapas de potenciais de risco de contaminação das águas subterrâneas para os quatros pesticidas utilizados na simulação	36
Figura 2.2.1	- Curva característica de água no solo	60

Figura 2.2.2	- Curva de retenção de água no solo e a correspondente curva da capacidade hídrica específica	60
Figura 2.2.3	- Representação do elemento de volume de controle	71
Figura 2.2.4	- Formas de isothermas de adsorção	73
Figura 2.2.5	- Relação entre a razão de absorção de água e o potencial matricial da água no solo	76
Figura 2.3.1	- Representação esquemática da região de estudo	80
Figura 2.3.2	- Discretização do perfil do solo em compartimentos utilizada na resolução da equação de Richards pelo método de diferenças finitas	82
Figura 2.3.3	- Fluxograma do programa HIDROSOLO	104
Figura 2.3.4	- Localização da área experimental	105
Figura 2.3.5	- Preparação e montagem de colunas indeformadas de solo e montagem do permeâmetro de carga constante para determinação da condutividade hidráulica e dos parâmetros de transporte	109
Figura 2.3.6	- Curvas de retenção de água estimadas usando os modelos de van Genuchten e Brooks-Corey	112
Figura 2.3.7	- Curvas de condutividade hidráulica do solo não saturado estimadas usando os modelos de van Genuchten e Brooks-Corey	113
Figura 2.3.8	- Estrutura molecular do Carbofuran (2,3-diidro-2,2-dimetilbenzofuran-7-il-metil carbamato) (IUPAC) ou 2,3-dihidro-2,2-dimetil-7- benzofuranil metilcarbamato (CA)	114
Figura 2.3.9	- Esquema de um cromatograma obtido na quantificação do Carbofuran em HPLC	116
Figura 2.3.10	- Vista de uma parcela experimental	118
Figura 2.3.11	- Dispositivo desenvolvido para aplicação de água em alta intensidade	119
Figura 2.3.12	- Análise de uniformidade de distribuição e da intensidade de aplicação da lâmina de irrigação utilizando a aspersão convencional na área experimental	120
Figura 2.3.13	- Aplicação das diferentes lâminas de irrigação	122
Figura 2.3.14	- Cronograma das atividades de campo e a evapotranspiração durante a realização do experimento	123
Figura 2.4.1	- Hidrogramas e a concentração do Carbofuran no escoamento superficial para as parcelas com cultura, nas repetições 1, 2 e 3, respectivamente	126
Figura 2.4.2	- Hidrogramas e a concentração do Carbofuran no escoamento superficial para as parcelas sem cultura, nas repetições 1, 2 e 3, respectivamente	127

Figura 2.4.3	– Tela principal do modelo HIDROSOLO	135
Figura 2.4.4	– Formulário de cadastro de pesticidas	136
Figura 2.4.5	– Formulário de cadastros das propriedades da superfície do solo	137
Figura 2.4.6	– Formulário de cadastros das propriedades físico-hídricas, químicas, textural e de ajuste da curva de retenção	137
Figura 2.4.7	– Formulário de cadastro de culturas	138
Figura 2.4.8	- Formulário de cadastro do clima	138
Figura 2.4.9	– Escolha do cenário a ser avaliado	139
Figura 2.4.10	– Telas referentes a escolha do modelo para o ajuste dos parâmetros da curva de retenção de água no solo	140
Figura 2.4.11	– Tela de entrada de informações específicas do solo analisado	141
Figura 2.4.12	– Tela de entrada de informações específicas da cultura	142
Figura 2.4.13	– Tela de entrada de informações sobre o manejo de água e de aplicação de pesticidas	142
Figura 2.4.14	– Tela de entrada das condições iniciais de água e de pesticida no perfil do solo	143
Figura 2.4.15	– Tela de escolha das condições de contorno referentes a água	143
Figura 2.4.16	– Tela de escolha das condições de contorno referentes ao soluto	144
Figura 2.4.17	– Tela de definição dos parâmetros de simulação	145
Figura 2.4.18	– Tela de apresentação dos resultados finais da simulação	145
Figura 2.4.19	- Perfis de umidade do solo observado e simulados, durante a aplicação da lâmina de 18 mm (A), nas primeiras 6 h (B) e nas primeiras 48 h (C) , após a última irrigação (16/10), para $\Delta z = 5$ cm e $\Delta t = 0,01$ h	149
Figura 2.4.20	- Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e com irrigação de 18 mm nos dias 9, 16 e 23/08/2002, a partir das condições iniciais 07/08/2002.....	152
Figura 2.4.21	- Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e com irrigação de 45 mm nos dias 9, 16 e 23/08/2002, a partir das condições iniciais 07/08/2002	153
Figura 2.4.22	- Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e com irrigação de 18 mm nos dias 16 e 23/08/2002, a partir das condições iniciais 07/08/2002	154

Figura 2.4.23	- Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e com irrigação de 45 mm nos dias 16 e 23/08/2002, a partir das condições iniciais 07/08/2002	155
Figura 2.4.24	- Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e 18 mm de irrigação para os dias 9, 16 e 23/08/2002 a partir dos dados do dia 07/08/2002	160
Figura 2.4.25	- Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e 18 mm de irrigação para os dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002	161
Figura 2.4.26	- Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e 45 mm de irrigação para os dias 9, 16 e 23/08/2002 a partir dos dados do dia 07/08/2002	162
Figura 2.4.27	- Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e 45 mm de irrigação para os dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002	163
Figura 2.4.28	- Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e 18 mm de irrigação para os dias 16 e 23/08/2002 a partir dos dados do dia 07/08/2002	164
Figura 2.4.29	- Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e 18 mm de irrigação para os dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002	165
Figura 2.4.30	- Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e 45 mm de irrigação para os dias 16 e 23/08/2002 a partir dos dados do dia 07/08/2002	166
Figura 2.4.31	- Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e 45 mm de irrigação para os dias 11/09 e 216/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002	167

LISTAS DE TABELAS

Tabela 1.1	– Classificação da mobilidade de pesticidas no solo quanto ao índice Li	22
Tabela 1.2	– Parâmetros físicos e químicos dos pesticidas utilizados na simulação	25
Tabela 1.3	– Parâmetros físico-hídricos médios da camada de 0 a 100 cm do solo do Distrito de Irrigação Gorutuba utilizados no cálculo do índice de lixiviação	26
Tabela 1.4	– Dados referentes a aplicação do Carbofuran, lâmina percolada e a classificação do risco de contaminação de água subterrâneas no 14 lotes do distrito de irrigação do Gorutuba	39
Tabela 1.5	– Características do solo da área experimental obtidos por VIEIRA et al. (2000) e o índice de lixiviação calculado pelo HIDROSOLO	40
Tabela 2.3.1	– Análise granulométrica e classificação textural do Cambissolo Háplico	106
Tabela 2.3.2	– Análise química para os diferentes horizontes do solo da área experimental	108
Tabela 2.3.3	– Parâmetros físico-hídricos dos horizontes do Cambissolo Háplico	110
Tabela 2.3.4	– Parâmetros dos modelos de Brooks-Corey e van Genuchten para o Cambissolo Háplico	111
Tabela 2.3.5	– Principais parâmetros físico-químicos do Carbofuran cadastrados no modelo	114
Tabela 2.3.6	– Parâmetros de transporte do pesticida no Cambissolo Háplico	117

Tabela 2.4.1	- Valores médios do teor de água no perfil do solo nas parcelas sem cultura e seus respectivos coeficientes de variação e intervalo de confiança	129
Tabela 2.4.2	- Valores médios do teor de água no perfil do solo nas parcelas com cultura e seus respectivos coeficientes de variação e intervalo de confiança	130
Tabela 2.4.3	- Valores médios de concentração de Carbofuran no perfil do solo nas parcelas sem cultura e seus respectivos coeficientes de variação e intervalo de confiança	132
Tabela 2.4.4	- Valores médios de concentração de Carbofuran no perfil do solo nas parcelas com cultura e seus respectivos coeficientes de variação e intervalo de confiança	133
Tabela 2.4.5	- Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados, para o perfil de umidade, usando o HIDROSOLO, para o modelo de Brooks-Corey, para diferentes Δz 's e Δt 's e lâminas de 18 e 45 mm de água	146
Tabela 2.4.6	- Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados, para o perfil de umidade usando, no HIDROSOLO, o modelo de Brooks-Corey, nas parcelas sem cultura	150
Tabela 2.4.7	- Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados, para o perfil de umidade usando, no HIDROSOLO, o modelo de Brooks-Corey, nas parcelas com cultura	150
Tabela 2.4.8	- Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados para a distribuição do Carbofuran, no perfil do solo usando o modelo de Brooks-Corey, nas parcelas sem cultura	157
Tabela 2.4.9	- Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados para a distribuição do Carbofuran, no perfil do solo usando o modelo de Brooks-Corey, nas parcelas com cultura	157

RESUMO

VIEIRA, Edson de Oliveira, D.S., Universidade Federal de Viçosa, setembro de 2003. **Índices de lixiviação e modelagem do transporte de pesticidas no solo.** Orientador: Mauro Aparecido Martinez. Conselheiros: Hélio Teixeira Prates e Antonio Teixeira de Matos.

Desenvolveu-se um modelo computacional para calcular o índice de lixiviação e o transporte unidimensional de água e solutos no solo sob condições de escoamento não permanente e considerando a presença de cultura e a degradação do produto no solo. O modelo desenvolvido em linguagem de programação DELPHI 5.0 denominado HIDROSOLO apresenta um banco de dados aberto, podendo o usuário cadastrar diversos parâmetros de solo, pesticida, planta e clima. O modelo HIDROSOLO foi avaliado em duas partes: a primeira constou da avaliação gerando índices de lixiviação para três inseticidas (Carbofuran, Prometrin e Carbaryl) e um herbicida (Fonofos) utilizados pelos produtores rurais no Distrito de Irrigação do Gorutuba (DIG) no município de Janaúba, Norte de Minas Gerais. Com o índice gerado pelo HIDROSOLO, criou-se uma base de dados relacional contendo informações das coordenadas geográficas e propriedades físico-hídricas do solo de 14 pontos de amostragem dentro do DIG e importada pelo programa ArcView GIS TM versão 3.2. Foram criados mapas contendo os limites das áreas classificadas pelo modelo como sendo de sem, baixo, moderado, médio e alto potencial de risco de contaminação da água subterrânea. O HIDROSOLO mostrou ser uma forma simples de avaliar o potencial de contaminação das águas

subsuperficiais para uma grande variedade de pesticidas sob várias condições edafoclimáticas e mostrou ser uma valiosa ferramenta, de fácil utilização, para a caracterização e levantamento de áreas com potenciais de riscos ambientais, fornecendo subsídios para o planejamento de ações de controle ambiental de empresas ligadas a esse setor. A segunda parte constou da avaliação do movimento de água e do transporte de um ingrediente ativo de pesticida no solo. O pesticida avaliado foi o Carbofuran. Para avaliar o modelo, montou-se um ensaio de campo constituído de 12 parcelas, nas quais foram aplicadas o Carbofuran na formulação granulada e incorporado na superfície do solo. As 12 parcelas foram divididas em quatro tratamentos com três repetições. Os tratamentos constaram de parcelas submetidas à aplicação, em uma hora, de lâminas de água de 18 e 45 mm, com e sem cultura. O experimento em campo foi realizado em 75 dias nos quais foram retiradas amostras de solo para determinação dos perfis de umidade e da distribuição do Carbofuran no solo. Também foram coletadas amostras de água do escoamento superficial. Os resultados experimentais foram comparados com os simulados pelo HIDROSOLO. O movimento de água no solo simulado pelo modelo computacional mostrou-se compatível com a realidade física do cenário estudado. A concentração do Carbofuran no perfil do solo apresentou altas variações entre os valores simulados e os obtidos experimentalmente, porém com comportamento semelhante no que se refere ao decaimento do produto com o tempo.

ABSTRACT

VIEIRA, Edson de Oliveira, D.S., Universidade Federal de Viçosa, September 2003.
Leaching index and modeling the pesticides transport in soil. Adviser: Mauro Aparecido Martinez. Committee members: Hélio Teixeira Prates and Antonio Teixeira de Matos

A computational model was developed in order to calculate the leaching index and the one-dimensional transport of water and solutes in the soil under non-steady conditions, by considering the presence of the crop and the degradation of the chemicals in the soil. The model was developed in the DELPHI 5.0 programming language so-called HIDROSOLO, which is provided with a free database that makes possible to register several parameters of the soil, chemicals, plants and climate. The HIDROSOLO model was evaluated into two steps: the first one consisted of the generation of leaching indexes for three insecticides (Carbofuran, Prometrin and Carbaryl) and one herbicide (Fonofos) that are usually used by rural producers in Gorutuba Irrigation District (DIG) in Janaúba county, on northern Minas Gerais. With the index generated by HIDROSOLO, a relational database was developed that contained information on the geographical coordinates and physical-hydric properties of the soil at 14 sampling points within DIG, and was imported by the ArcView GIS™ program, version 3.2. Maps containing the limits of the areas were generated. The model classified these areas as a zero, low, moderate, medium and high risk potential for contamination of the underground water. HIDROSOLO

showed to be a simple form to evaluate the potential for contamination of the subsurface waters to a wide variety of pesticides under several edaphoclimatic conditions, besides being a valuable and easily used tool for the characterization and survey of the areas with potentials for environmental risks, while supplying subsidies for planning the environmental control actions of the companies related to this sector. The second step consisted of evaluating the water movement and the transport of an active pesticide ingredient in the soil. The appraised pesticide was Carbofuran. To evaluate the model, an assay consisting of 12 plots was set up in the field. The Carbofuran under a granulated formula was applied to those plots, and incorporated into the soil surface. Those twelve plots were divided into four treatments with three replicates. The treatments consisted of submitting the plots to the application of water depths (18 and 45 mm) with and without the bean crop. The field experiment was carried at a time interval of 75 days over which the soil samples were removed for determination of the moisture profiles and the Carbofuran distribution in the soil. Some water samples of the surface runoff were collected. The experimental results were compared to those simulated by HIDROSOLO. The soil water movement simulated by the computational model showed to be compatible with the physical reality of the studied scenery. The concentration of Carbofuran in the soil profile presented high variations among the simulated values and those obtained experimentally, but with a similar behavior concerning to the decay of this chemical over the time.

INTRODUÇÃO GERAL

Os pesticidas são utilizados na agricultura com o objetivo de prevenir a incidências de pragas e doenças garantindo, assim, a produção potencial das culturas. No entanto, com o aumento de uso destes produtos, aumentaram também as preocupações com problemas de contaminação ambiental (REGITANO et al., 2000). Atualmente, apesar do grande número de pesquisas nessa área, ainda é difícil avaliar os riscos de contaminação ambiental decorrentes do uso de defensivos agrícolas, devido ao grande número e fatores envolvidos na dinâmica destas substâncias no ambiente.

Quando moléculas de um determinado pesticida são aplicadas no ambiente, seja qual for a forma dessa aplicação, o destino final, na maioria dos casos é o solo. Atingindo o solo, as moléculas podem seguir diferentes rotas, isto é, podem ser retidas na matriz do solo passando a ser indisponível, ou serem novamente liberadas à solução do solo pelo processo conhecido como dessorção. As moléculas também podem ser transformadas em outras, chamadas de produtos de transformação ou metabólitos. Se essas moléculas se encontram na solução do solo, podem ser absorvidas pelas raízes das plantas, ou serem lixiviadas para camadas profundas. Essas moléculas podem, ainda, ser transportadas do sistema pelo escoamento superficial ou volatilizadas (CHENG, 1990; PRATA, 2002).

A falta de recursos impede a condução de experimentos com os diferentes compostos, nas diversas condições de clima e solo existentes. No entanto, pode-se ter

boa indicação sobre o potencial de contaminação de um pesticida, conhecendo-se os principais fatores que afetam o seu comportamento no solo. Com o conhecimento desses fatores aliado à modelagem matemática, obtém-se uma valiosa ferramenta para auxiliar nos estudos do comportamento dessas moléculas no solo, reduzindo o tempo e os recursos financeiros necessários em estudos experimentais.

Os modelos matemáticos, entre outras funções, buscam avaliar o desempenho de processos que possam induzir o aparecimento de impactos negativos, além de ser ferramenta de grande utilidade na compreensão das particularidades envolvidas nesses processos. Muitas vezes, também, permitem visualizar, probabilisticamente, o desempenho futuro do sistema, ante a criação de diferentes cenários de aplicação ainda não explorados em experimentos reais, alertando o pesquisador para novas alternativas de pesquisas futuras ou testes mais direcionados (PESSOA et al. 1997).

O presente trabalho foi dividido em dois capítulos, sendo o primeiro, relacionado ao modelo computacional para calcular o potencial de risco de pesticida em diferentes cenários edafoclimáticos, utilizando o conceito da fugacidade. O segundo capítulo refere-se ao modelo computacional para descrever o movimento de água e solutos no solo, considerando processos como o movimento convectivo-dispersivo de solutos, extração de água e soluto pelo sistema radicular das plantas e a degradação do pesticida. Este trabalho é uma contribuição para elucidação do complexo sistema que envolve as inter-relações entre o solo, a água e os solutos.

CAPÍTULO 1

MODELO COMPUTACIONAL PARA CÁLCULO DO ÍNDICE DE LIXIVIAÇÃO E AVALIAÇÃO DO RISCO DE CONTAMINAÇÃO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

1.1. INTRODUÇÃO

O uso de pesticidas é um dos fatores que mais contribui para evitar perdas contribuindo para o aumento da produção e, conseqüentemente, dos rendimentos na agricultura. Segundo RICHARDSON (1988), os pesticidas podem evitar até 40% de perdas das culturas nas lavouras, justificando assim, economicamente e socialmente o seu uso. Do ponto de vista ecológico, a necessidade do uso de pesticidas é devido ao fato de que o agroecossistema é um sistema aberto (ecossistema artificial) onde parte da energia oriunda do sol é retirada por meio das colheitas. Conseqüentemente, a sustentabilidade deste sistema depende de energia adicional, artificialmente fornecida pelos agricultores por meio de práticas agrícolas comuns, como o preparo do solo, aplicação de fertilizantes e pesticidas agrícolas, irrigação, dentre outros (FINIZIO e VILLA, 2002). Porém, a forma inadequada e indiscriminada do uso de pesticidas, promove uma série de problemas agronômicos, como o aumento do número de espécies de pragas, plantas e patógenos cada vez mais resistentes, e problemas ambientais como a contaminação de alimentos, solo e águas subterrâneas trazendo problemas a saúde de animais e dos seres humanos. A agricultura torna-se, assim, um dos maiores responsáveis pela poluição de cursos d'água em todo o planeta (FOOD AND AGRICULTURE ORGANIZATION - FAO, 1996).

Normalmente o solo é o destino final dos pesticidas utilizados na agricultura. Uma vez atingido o solo, esses compostos poderão seguir, simultaneamente, diversas rotas, podendo ficar retidos na fração orgânica, no mineral do solo, ou mesmo disponível na solução do solo. Uma vez retido na fração sólida, o composto poderá

ficar indisponível para as plantas e organismos. Estando na solução do solo, o pesticida poderá ser absorvido por microrganismos e plantas, escoado superficialmente ou volatilizado para a atmosfera, degradado química e biologicamente, ou ainda, transportado para camadas inferiores podendo atingir o lençol freático. A intensidade em que ocorrerão essas reações e interações no solo, dependerá das propriedades físicas, químicas e biológicas do meio, e físico-químicas do pesticida, além de fatores externos como o climático (REGITANO et al., 2000; KOSKINEN e HARPER, 1990).

Uma vez atingindo camadas profundas, o pesticida poderá comprometer a qualidade das águas subterrâneas, alterando suas propriedades físicas, químicas e biológicas tornando-a poluída (FAO, 1996). Porém, a água subterrânea não é tão facilmente contaminada como as águas superficiais, devido a uma série de fatores dentre os quais podem ser citados: as diversas formas de interações entre os poluentes e o meio e o baixo fluxo da água e dos poluentes no meio poroso a que está submetido. Todavia, uma vez contaminada, altos custos e longo período de tempo são necessários para sua remediação, comparativamente com o que é necessário para as águas superficiais.

A predição e prevenção dessa contaminação são preferíveis ao monitoramento regular da qualidade das águas subterrâneas. A utilização de modelos computacionais pode auxiliar na predição da contaminação das águas subterrâneas, permitindo uma enorme economia de tempo e de recursos financeiros. Estudos experimentais de campo, além de extremamente trabalhosos, demandam muito recurso, tempo e esforço humano, o que muitas vezes inviabilizam o estudo do comportamento e o monitoramento ambiental da maioria das substâncias utilizadas na agricultura (WAGENET e RAO, 1985; NATIONAL RESEARCH COUNCIL-NRC, 1990; RAMSAY et al. 2002; FILIZOLA et al. 2003).

Alguns índices de lixiviação foram desenvolvidos na tentativa de se classificar pesticidas quanto ao risco de contaminação de águas subterrâneas. No entanto, esses índices consideram apenas alguns parâmetros físico-químicos de compostos e solo, ou de cada um deles de forma isolada e pouco interativa, não descrevendo de forma satisfatória os diversos processos que regem a sorção e mobilidade no solo.

Os índices de lixiviação em escala regional são úteis em processos de tomada de decisão ou de remediação quando comparados com modelos baseados em

simulações numéricas os quais demandam uma variedade grande de parâmetros muitos deles difíceis de serem obtidos.

Pouco se sabe sobre o destino dos pesticidas nos solos brasileiros. Isto se deve principalmente à falta de recursos que impede a condução de experimentos com diferentes compostos considerando-se a diversificada condição edafo-climática brasileira.

O desenvolvimento de modelos computacionais no Brasil é, ainda, incipiente, limitando-se à determinação de resíduos, movimentação e degradação de pesticidas, metais pesados e nutrientes (OLIVEIRA, 1999). Assim, torna-se relevante o desenvolvimento de um modelo computacional que considere um índice de lixiviação que forneça subsídios para a tomada de decisões em estratégias de manejo e preservação do meio ambiente.

Diante do exposto, os objetivos desse trabalho foram:

- desenvolver um modelo computacional para calcular o índice de lixiviação considerando-se as características físico-hídricas do solo, parâmetros físico-químicos do pesticida, dados climatológicos e a massa inicial aplicada desse pesticida; e

- associar o índice de lixiviação gerado pelo modelo computacional ao sistema de informações geográficas gerando mapas de potencial de risco de contaminação de águas subterrâneas por pesticidas.

1.2. REVISÃO DE LITERATURA

1.2.1. Distribuição e importância das águas subterrâneas

As águas que atingem a superfície do solo por meio de precipitações, retidas nas depressões do terreno ou escoando ao longo de talvegues, podem atravessar a superfície do solo, caracterizando o processo de infiltração, se redistribuir no perfil passando a fazer parte de um meio poroso heterogêneo e de elevado grau de complexidade.

Ao se infiltrar no solo, a água se sujeita à atração molecular, à tensão superficial, à ação da gravidade e da capilaridade (GIRODO, 2002). De acordo com a proporção relativa do espaço poroso ocupado pela água, o perfil do solo pode ser dividido basicamente em duas zonas; a não saturada e a saturada. Na primeira, os interstícios são parcialmente ocupados por água e ar. Na segunda, a água ocupa todos os vazios prevalecendo a pressão hidrostática.

A zona de aeração situa-se entre a superfície freática e a superfície do terreno e nela os poros estão parcialmente preenchidos por gases. Essa região pode ser subdividida em três subzonas (Figura 1.1):

- subzona de água do solo ou zona de evapotranspiração: mais próxima à superfície, situado entre os extremos radiculares da vegetação e a superfície do terreno. Nesse domínio as plantas utilizam, para suas funções de transpiração e nutrição, água capilar isolada ou suspensa (MANOEL FILHO, 1997a);

- subzona intermediária ou zona vadosa: com água adsorvida nas partículas e micelas dos solos atraídas pelas forças de adesão e água em movimento para as posições mais baixas, movidos pela força da gravidade; e
- subzona capilar: que ascende da zona saturada devido a fenômenos capilares. Sua espessura depende principalmente da distribuição tamanho dos poros.

Na zona de saturação encontra-se a água subterrânea, possível de ser explorada por diversas técnicas e para diversas finalidades. Essa zona fica abaixo da superfície freática e nela todos os poros estão preenchidos com água. A superfície freática é definida como o lugar geométrico em que a água se encontra submetida à pressão atmosférica. Embora toda água situada abaixo da superfície do solo seja evidentemente subterrânea, na hidrogeologia a denominação ‘água subterrânea’ é atribuída apenas à água que circula na zona saturada (MANOEL FILHO, 1997a).

O fato das águas superficiais serem visíveis, a maioria das pessoas imagina que tais águas devam ser as principais fontes no atendimento das necessidades do homem. Todavia, um pouco mais de 97% da água doce disponível no planeta encontra-se no subsolo. O abastecimento de várias cidades no Brasil e no mundo, além de uma extensa área irrigada depende das águas subterrâneas. Segundo dados do INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA - IBGE (2001), 61% da população brasileira é abastecida por águas subterrâneas. A migração dos contaminantes, a partir dos solos, para as águas subterrâneas constitui ameaça para a qualidade dos recursos hídricos, a saúde do homem e o meio ambiente, pois esse recurso é utilizado não só para o abastecimento público, mas industrial, agrícola, comercial, lazer e serviços.

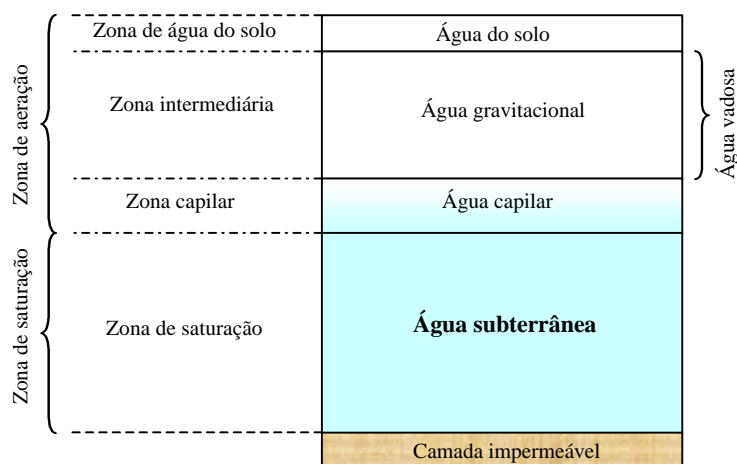


Figura 1.2– Distribuição das águas na subsuperfície do solo.

1.2.2. Aspectos gerais da contaminação das águas subterrâneas

Até o início dos anos 80 os solos eram considerados excelentes filtros, evitando que substâncias perigosas depositadas na superfície atingissem as águas subterrâneas. Sabe-se hoje, que os solos possuem uma capacidade limitada de filtração, depuração e imobilização de poluentes (NRC, 1993).

Os pesticidas contribuem significativamente para a poluição de águas subterrâneas. Segundo a Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY - EPA, 1987), estima-se que, a cada ano, são utilizados em torno de 300 mil toneladas de ingredientes ativos de pesticidas na agricultura. Segundo essa mesma agência, um extenso monitoramento conduzido naquele país verificou que cerca de 10,4% dos poços freáticos localizados em comunidades rurais e 4,2 % dos poços em propriedades rurais particulares apresentaram resíduos de um ou mais ingrediente ativo de pesticidas.

No Brasil, segundo IBGE (1999), estima-se que sejam aplicados cerca de 3,2 kg/ha.ano de ingredientes ativo em áreas cultivadas. Fazendo-se o cruzamento dessa informação com dados de áreas cultivadas apenas pelas sete principais culturas no país, fornecidos também pelo IBGE (2001), obtém-se o valor de 137.850 toneladas de ingredientes ativos aplicados dentro de um ano agrícola. Parte desses produtos, além das diversas rotas que podem seguir, poderão atingir as águas subterrâneas. Segundo FERREIRA (2000), apesar da diminuição do uso de pesticidas pelos

produtores, por questões econômicas, o consumo no Brasil ainda é crescente devido a áreas introduzidas, a cada ano, no processo produtivo.

Vários trabalhos descritos na literatura verificaram a existência de resíduos de pesticidas em águas subterrâneas em diversas regiões do planeta, o que demonstra a importância de estudos no que se refere à compreensão dos fatores envolvidos no processo de retenção e movimento desses compostos. Por outro lado, foram desenvolvidos, modelos matemáticos, físicos e computacionais para a predição e remediação dessas unidades geológicas contaminadas (ISENSEE et al., 1990; BENGTSON et al., 1990; SMITH et al., 1990; RITTER et al. 1994; GISH et al., 1991; BANDARANAYAKE et al., 1998; AGRAWAL, 1999; DONOSO et al. 1999; JOHNSON et al., 2001; BOUMAN et al., 2002; HARIA et al., 2003).

1.2.3. Fatores relacionados à contaminação das águas subterrâneas por pesticidas

O potencial de um contaminante lixiviar e atingir as águas subterrâneas dependerá de uma série de fatores tais como as propriedades químicas, físicas e físico-hídricas do solo na zona não saturada, a profundidade do lençol freático e sua taxa de recarga e fatores do ambiente (climáticos e biológicos) agindo na sua biodegradação (NRC, 1993).

A composição mineral da zona não saturada pode influenciar enormemente as transformações e reações do composto poluente (MANOEL FILHO, 1997b). Por exemplo, o conteúdo de argila, matéria orgânica, pH entre outros, aumentam a sorção de um composto, diminuindo sua lixiviação, com conseqüente redução no potencial de contaminação da água subterrânea. A profundidade do lençol freático torna-se importante quando se considera o percurso do contaminante e a sua disponibilidade aos processos de sorção e degradação. Assim, para lençóis freáticos mais próximos à superfície, o potencial de contaminação por um composto torna-se maior. A recarga também é importante devido ao seu efeito no volume e taxa de transporte de contaminantes ao longo da zona não saturada. Finalmente, dentre os fatores ambientais, a temperatura e a umidade do solo são os que mais influenciam na perda de contaminantes por transformações microbiológicas.

1.2.4. Avaliação da vulnerabilidade de contaminação de águas subterrâneas

A Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (EPA) agrupou os métodos de avaliação de contaminação das águas subterrâneas em três categorias (NRC, 1993):

- a – métodos que empregam índices de potencialidades;
- b – métodos que empregam modelos de simulação baseados em processos; e
- c – métodos estatísticos.

A primeira categoria agrupa modelos baseados na combinação de atributos hidrogeológicos de uma região e de propriedades físico-químicas dos compostos, resultando em índices numéricos relacionados a potencialidades de lixiviação ou de contaminação de águas subterrâneas. A maioria desses modelos, por serem usados em escalas regionais, possui uma denotação qualitativa dessa potencialidade.

A segunda categoria agrupa modelos que trabalham em nível de processos. Requerem soluções analíticas ou numéricas de equações matemáticas que descrevem os processos que governam o movimento de água e o transporte de contaminantes em zonas não saturadas do solo. Caracterizam-se por serem métodos quantitativos em sua maioria e trabalham em cenários mais específicos.

A terceira categoria agrupa modelos estatísticos e utilizam a concentração de um contaminante ou a sua probabilidade de contaminação como uma variável dependente. Esses métodos incorporam dados de distribuição de contaminantes e fornecem a caracterização de potencial de contaminação para uma área geograficamente específica de onde os dados foram obtidos.

1.2.4.1. Índices de lixiviação

Vários índices de lixiviação da categoria 'A' foram desenvolvidos na tentativa de se classificar pesticidas quanto ao seu risco de contaminar as águas subterrâneas. Alguns se baseiam apenas no coeficiente de partição carbono-água do composto (K_{oc}) e na meia vida ($t_{1/2}$), como o proposto pelo CDFA (Califórnia Department of Food and Agriculture), o qual estabelece que, pesticidas com $K_{oc} < 512 \text{ L kg}^{-1}$ e $t_{1/2} > 11$ dias são compostos com alto potencial de lixiviação.

Outros índices consideram apenas alguns parâmetros físico-químicos dos compostos e do solo ou de cada um deles de forma isolada e pouco interativa. GUSTAFSON (1989) propôs o índice GUS (Groundwater Ubiquity Score), o qual indica o risco de um composto orgânico atingir o lençol freático utilizando apenas o coeficiente de partição carbono-água e a meia vida do produto no solo:

$$\text{GUS} = (\log t_{1/2})(4 - \log K_{oc}) \quad (1.2.1)$$

em que:

- GUS = índice de lixiviação (ads);
- $t_{1/2}$ = meia vida do pesticida no solo (T);
- K_{oc} = Coeficiente de partição carbono-água ($L^3 M^{-1}$);

O índice GUS é um valor empírico, classificando o pesticida de acordo com sua capacidade de lixiviação:

- pesticidas com $\text{GUS} < 1,8$ são não-lixiviadores;
- pesticidas com $\text{GUS} > 2,8$ são lixiviadores; e
- pesticidas com $1,8 < \text{GUS} < 2,8$ são intermediários.

RAO et al. (1985) citado por LOAQUE et al. (1989), desenvolveram o fator de atenuação (AF - Attenuation Factor), o qual representa uma fração da massa de um pesticida que permanece no solo após um determinado tempo. Esse índice varia de 0 a 1, e quanto mais próximo de 1 maior a possibilidade de lixiviação. Esse índice é definido como:

$$\text{AF} = \exp\left(\frac{-0,693 \cdot d \cdot \text{RF} \cdot \theta_{cc}}{R_L \cdot t_{1/2}}\right) \quad (1.2.2)$$

sendo:

$$\text{RF} = 1 + \frac{\rho_s \cdot f_{oc} \cdot K_{oc}}{\theta_{cc}} + \frac{\epsilon_a \cdot K_H}{\theta_{cc}} \quad (1.2.2a)$$

em que:

- d = profundidade analisada do solo (L);
 R_L = recarga líquida do lençol freático ($L T^{-1}$);
 ϵ_a = porosidade preenchida com ar quando o solo está na capacidade de campo, ($L^3 L^{-3}$);
 θ_{cc} = teor de água do solo na capacidade de campo ($L^3 L^{-3}$);
 RF = fator de retardamento (ads);
 ρ_s = massa específica do solo ($M L^{-3}$);
 f_{oc} = fração de carbono orgânico do solo = 0,56MO (matéria orgânica do solo) (ads); e
 K_H = constantes de Henry (ads).

MEEKS e DEAN (1990) propuseram um índice de potencial de lixiviação (LPI- Leaching Potential Index) definido como:

$$LPI = \frac{10^3 v}{RF\lambda d} \quad (1.2.3)$$

em que:

- v = velocidade média da água nos poros da zona vadosa ($L T^{-1}$); e
 λ = coeficiente de degradação de primeira ordem (T^{-1}).

Apesar de um pouco mais complexos, os dois últimos índices não contemplam satisfatoriamente processos, uma vez que requerem poucos parâmetros do pesticida, principalmente no que se refere à quantidade aplicada.

BACCI e GAGGI (1993) desenvolveram um índice que contempla melhor essa interação pesticida-solo. Esse índice de lixiviação denominado Li (Leaching index) foi derivado do modelo “Surface Soil” de MACKAY (1991) e de uma versão simplificada dos modelos de JURY et al. (1983), JURY et al. (1984a) e JURY et al. (1984b). Os autores acima citados fazem uma analogia ao conceito da fugacidade utilizado para gases. A fugacidade introduz o conceito termodinâmico de transferência de massa entre compartimentos ambientais ou fases (atmosfera, água, solo, biota, sólidos suspensos e sedimentos) e pode ser compreendida como uma “tendência de escape” de uma substância de uma determinada fase do ambiente. Na atmosfera, a fugacidade é usualmente igual à pressão parcial de vapor da substância. O equilíbrio é atingido entre duas fases quando essa “tendência de escape” de uma fase se iguala à da outra. Assim, essas fases podem transferir ou trocar solutos entre

si, mas a taxa líquida da troca será zero, isto é, suas fugacidades serão iguais (MACKAY e PATERSON, 1981; MACKAY e PATERSON, 1982). O cálculo da fugacidade pode ser aplicada num ambiente real com compartimentos de volumes conhecidos, porém, é mais conveniente usar ambientes avaliativos ou hipotéticos.

Uma peculiaridade da fugacidade é sua relação linear com a concentração em baixas concentrações do meio, o que normalmente se aplica aos contaminantes ambientais. Assim como a temperatura ($^{\circ}\text{C}$) pode ser relacionada com a concentração de calor de um meio (cal m^{-3}) por meio de uma constante de proporcionalidade, como o calor específico volumétrico ($\text{cal m}^{-3} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$), a fugacidade (f) pode ser relacionada com a concentração usando uma constante similar, no caso a capacidade de fugacidade (Z). A relação concentração-fugacidade pode ser escrita de seguinte forma:

$$C = f \cdot Z \quad (1.2.4)$$

em que:

C = concentração (M L^{-3});

f = fugacidade ($\text{M L}^{-1} \text{ T}^{-2}$); e

Z = capacidade de fugacidade ($\text{T}^2 \text{ L}^{-2}$).

A capacidade de fugacidade (Z) depende da temperatura, pressão, da natureza da substância e do meio no qual está presente.

Detalhes desse modelo de lixiviação serão descritos no item Material e Métodos.

1.3. MATERIAL E MÉTODOS

1.3.1. Modelo matemático do Índice de Lixiviação (Li)

O modelo computacional é composto por dois módulos relacionados com: 1) o cálculo do índice de lixiviação e 2) o movimento de água e solutos no solo. Neste primeiro capítulo será abordado apenas o módulo do índice de lixiviação. Este módulo permite fazer uma pré-análise da lixiviação de um composto químico aplicado como fonte não pontual no solo, com características físico-hídricas definidas, possibilitando, assim, verificar a necessidade ou não de uma análise mais criteriosa desse produto químico quanto à contaminação do solo e de águas subterrâneas.

Como base do modelo computacional foi utilizado o índice de lixiviação descrito por BACCI e GAGGI (1993). Segundo os autores, a quantidade de pesticida lixiviada de uma camada de solo no intervalo de tempo $\Delta t = t_2 - t_1$ pode ser estimada como:

$$LM_t = \int_{t_1}^{t_2} J_{L(t)} dt \quad (1.3.1)$$

em que:

LM_t = massa total do composto lixiviada da camada do solo no intervalo de tempo Δt por unidade de área ($M L^{-2}$) e

$J_{L(t)}$ = fluxo do composto lixiviado ($M L^{-2} T^{-1}$).

Assumindo cinética de primeira ordem, tem-se:

$$J_{L(t)} = J_{L(0)} \exp(-k_{dis} t) \quad (1.3.2)$$

em que:

$J_{L(0)}$ = fluxo inicial de lixiviação do pesticida na superfície do solo ($M L^{-2} T^{-1}$).

k_{dis} = taxa permanente de perda do composto (T^{-1}); e

t = tempo decorrido do processo (T).

Substituindo a equação 1.3.2 em 1.3.1 e integrando-a, tem-se:

$$LM_t = J_{L(0)} \frac{1}{k_{dis}} [\exp(-k_{dis} t_1) - \exp(-k_{dis} t_2)] \quad (1.3.3)$$

Considerando que t_1 seja igual a zero no momento da aplicação do pesticida, a quantidade lixiviada no tempo 't' após essa aplicação foi dado por:

$$Li = \frac{J_{L(0)}}{k_{dis}} [1 - \exp(-k_{dis} t)] \quad (1.3.4)$$

Dividindo a Equação 1.3.4 pela massa inicial do pesticida aplicado ao solo (M_0), obtém-se:

$$Li = \frac{J_{L(0)}}{M_0 k_{dis}} [1 - \exp(-k_{dis} t)] \quad (1.3.5)$$

sendo

Li = índice de lixiviação (ads) e

M_0 = massa inicial do pesticida aplicada por unidade de área ($M L^{-2}$).

No cálculo do índice Li , BACCI e GAGGI (1993) consideraram o intervalo de tempo de um ano. Tempo em que se assume que 90% do resíduo da maioria dos compostos são eliminados da camada superficial do solo.

A variável $J_{L(0)}$ do índice Li foi calculada da seguinte forma:

$$J_{L(0)} = f \frac{D_{Lix}}{A} \quad (1.3.6)$$

sendo:

D_{Lix} = parâmetro de reação à lixiviação (L T) e
 A = área da superfície onde foi aplicado o pesticida (L²).

O parâmetro de reação de resistência à lixiviação foi calculado da seguinte forma:

$$D_{Lix} = R_L \frac{S_p}{P_v} \quad (1.3.7)$$

em que:

R_L = recarga líquida do lençol freático (L³ T⁻¹);
 S_p = solubilidade em água (M L⁻³); e
 P_v = pressão de vapor da substância (M L⁻¹ T⁻²).

Em condição de equilíbrio a partição do pesticida nos componentes do solo (ar, água, matéria orgânica e mineral) é calculada por meio das propriedades físico-químicas e de partição do composto, depois de definidos os volumes e as densidades desses componentes (MACKAY, 1991). Sendo assim, no equilíbrio, a massa de um pesticida no solo (M) foi calculada como sendo a soma dos produtos entre a concentração (C_i) e volume (V_i) de cada compartimento:

$$M = C_{ar} V_{ar} + C_{ag} V_{ag} + C_{MO} V_{MO} + C_{MM} V_{MM} \quad (1.3.8)$$

em que:

M = massa total aplicada, $M = M_0 A$ (M);
 ar = subscrito para o compartimento ar;
 ag = subscrito para o compartimento água;
 MO = subscrito para o compartimento matéria orgânica; e
 MM = subscrito para o compartimento matéria mineral do solo.

De acordo com a definição de fugacidade, Equação 1.2.4, a concentração de um contaminante no compartimento é igual ao produto de sua fugacidade (f) e sua capacidade de fugacidade (Z). Reescrevendo a Equação 1.3.8, tem-se:

$$M = f (Z_{ar} V_{ar} + Z_{ag} V_{ag} + Z_{MO} V_{MO} + Z_{MM} V_{MM}) \quad (1.3.9)$$

e

$$M = \sum_i f Z_i V_i \quad (1.3.10)$$

sendo o índice 'i' cada compartimento.

Com isso a fugacidade foi calculada como:

$$f = \frac{M}{\sum V_i Z_i} \quad (1.3.11)$$

Os valores de Z_i e V_i para cada compartimento foram obtidos da seguinte forma:

$$V_{ar} = A d \varepsilon_a \quad (1.3.12)$$

$$V_{ag} = A d \theta_{cc} \quad (1.3.13)$$

$$V_{MO} = A d f_{oc} \quad (1.3.14)$$

$$V_{MM} = A d (1 - \varepsilon - f_{oc}) \quad (1.3.15)$$

em que:

ε = porosidade total do solo, ($L^3 L^{-3}$);

ε_a = porosidade livre quando o solo está na capacidade de campo ($L^3 L^{-3}$); e

d = profundidade analisada (L).

Os valores de ε_a e ε são calculados utilizando-se Equações 1.3.16 e 1.3.17 respectivamente:

$$\varepsilon = 1 - \frac{\rho_s}{\rho_p} \quad (1.3.16)$$

$$\varepsilon_a = \varepsilon - \theta_{cc} = \varepsilon - \theta_{cc} \quad (1.3.17)$$

em que:

ρ_p = massa específica das partículas do solo ($M L^{-3}$);

O valor de 'd' foi considerado como sendo a profundidade efetiva do sistema radicular, pois, assume-se que, uma vez o pesticida tendo ultrapassado essa

profundidade, estará menos disponível aos processos de degradação, sorção e absorção pela planta, ficando assim mais susceptível à lixiviação.

Os valores das capacidades de fugacidade para cada compartimento, podem ser calculados da seguinte forma:

$$Z_{ar} = \frac{1}{RT} \quad (1.3.18)$$

$$Z_{ag} = \frac{S_p}{P_v} \quad (1.3.19)$$

$$Z_{MO} = \frac{S_p}{P_v} K_{oc} \rho_s \quad (1.3.20)$$

$$Z_{MM} = \frac{S_p}{P_v} K_{MM} \rho_s \quad (1.3.21)$$

em que:

R = constante universal dos gases (8,314 Pa m³ mol⁻¹ K⁻¹), (L² T⁻² K⁻¹);

T = temperatura (K);

K_{oc} = coeficiente de partição água/carbono orgânico (L³ M⁻¹) e

K_{MM} = coeficiente de partição água/matéria mineral (L³ M⁻¹).

Para compostos químicos não polares, K_{MM} pode ser considerado zero, assim, utilizando as Equações de 1.3.12 a 1.3.21, obteve-se o valor de $\sum V_i Z_i$:

$$\sum V_i Z_i = A \times d \left(\left[\left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_p} \right) - \theta_{cc} \right] \frac{1}{RT} + [\theta_{cc} + (f_{oc} K_{oc} \rho_s)] \frac{S_p}{P_v} \right) \quad (1.3.22)$$

Entretanto, segundo BACCI (1994), para compostos polares obteve-se K_{MM} da seguinte forma:

$$K_{MM} = K_d / f_{MM} \quad (1.3.23)$$

sendo K_d o coeficiente de partição água/solo e f_{MM} a fração volumétrica da matéria mineral do solo. Assim, para compostos polares obteve-se:

$$\sum_{i=1}^n V_i Z_i = A \times d \left(\left[\left(1 - \frac{\rho_s}{\rho_p} \right) \theta_{CC} \right] \frac{1}{RT} + \left[\theta_{CC} + (f_{oc} K_{oc} \rho_s) + \frac{K_d}{f_{MM}} \tilde{n}_s \right] \frac{S_p}{Pv} \right) \quad (1.3.24)$$

Uma vez obtido o valor do $\sum V_i Z_i$, calcula-se o valor de f podendo assim, calcular $J_{L(0)}$.

Para o cálculo da taxa de perda do pesticida no perfil do solo (k_{dis}), devem ser considerados os processos de volatilização, degradação, lixiviação e escoamento superficial (MACKAY, 1991; BACCI, 1994):

$$k_{dis} = k_{Vol} + k_{Deg} + k_{Lix} \quad (1.3.25)$$

em que:

k_{Deg} = taxa constante de perda do composto por degradação (T^{-1});

k_{Vol} = taxa constante de perda do composto por volatilização (T^{-1}); e

k_{Lix} = taxa constante de perda do composto por lixiviação (T^{-1}).

Os processos que contribuem para a degradação química ou biológica de um pesticida no solo são complexos e sua dependência funcional com parâmetros ambientais e do solo, como umidade, temperatura, carbono orgânico e pH não são bem entendidos ou difíceis de serem mensurados (JURY et al. 1983; BOLLAG e LIU, 1990; JURY e GARDNER, 1991). Entretanto, o parâmetro de reação à degradação (D_{Deg}) foi calculado de forma simplificada por meio do valor de meia vida do composto ($t_{1/2}$) o qual fornece a taxa constante de degradação (k_{Deg}):

$$k_{Deg} = \frac{\ln 2}{t_{1/2}} \quad (1.3.26)$$

Segundo JURY et al. (1983), o solo e a atmosfera estão conectados por uma camada limite de ar estagnado, no qual o vapor de água e pesticidas movem-se por difusão. Entretanto, a extensão dessa camada que limita o fluxo de volatilização pode ser usada como um critério para a classificação de pesticida quanto a sua perda no solo. Com isso, para o cálculo do parâmetro de reação à volatilização (D_{Vol}) torna-se necessária a utilização de outros três valores de D :

a) parâmetro de resistência à de difusão do ar na camada limite (D_E):

$$D_E = A B_A Z_{ar} = 3,77 \frac{A}{RT} \quad (1.3.27)$$

sendo D_E , expresso em mh, A representa a área do solo em que se aplicou o pesticida e B_A um coeficiente de transferência de massa, o qual foi considerado igual a 3,77 m/h para uma espessura de camada limite de 0,00475 m (BACCI, 1994).

b) parâmetro de difusão do pesticida no ar (D_a), que caracteriza a taxa de transferência do vapor do pesticida na atmosfera do solo:

$$D_a = AB_{ea} \frac{Z_{ar}}{Y} \quad (1.3.28)$$

em que:

Y = é o comprimento do caminho da difusão, considerada a metade da profundidade do solo, $Y = d/2$ (L); e

B_{ea} = difusividade efetiva do pesticida no ar ($L^2 T^{-1}$).

O valor de B_{ea} foi calculado utilizando a equação de tortuosidade do meio poroso de Millington-Quirk (SHEARER, 1973):

$$B_{ea} = B_w \frac{\epsilon_a^{10/3}}{\epsilon^2} \quad (1.3.29)$$

sendo B_w a difusividade molecular de compostos químicos no ar. Assumindo B_w igual a 0,0179 m²/h (JURY et al.,1983) e substituindo as Equações 1.3.18 e 1.3.29 em 1.3.28 obteve-se a expressão final de D_a :

$$D_a = 0,0179 \frac{\epsilon_a^{10/3} A}{\epsilon^2 \frac{RT}{d}} \quad (1.3.30)$$

ou

$$D_a = 0,0358 \frac{\epsilon_a^{10/3} A}{\epsilon^2 RTd} \quad (1.3.31)$$

c) parâmetro de difusão do pesticida na fase aquosa do solo (D_w) foi calculado de forma similar a D_a :

$$D_w = AB_{ew} \frac{Z_{ag}}{Y} \quad (1.3.32)$$

e

$$B_{ew} = B_{ag} \frac{\epsilon_a^{10/3}}{\epsilon^2} \quad (1.3.33)$$

em que B_{ew} é um coeficiente de transferência de massa em água, e B_{ag} é a difusividade molecular em água. Segundo JURY et al. (1983), o coeficiente molecular em água, B_{ag} , pode assumir o valor de $1,79 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ h}^{-1}$ como sendo representativo para a maioria dos pesticidas. Fazendo as substituições, similarmente àquelas feitas para a Equação 1.3.31, a expressão final de D_w assume a seguinte forma:

$$D_w = 3,58 \times 10^{-6} \frac{\epsilon_a^{10/3}}{\epsilon^2} \frac{AS_p}{Pvd} \quad (1.3.34)$$

Segundo MACKAY (1991), como o valor da difusão D_a e D_w são aplicados em paralelo, o valor de D para a transferência do pesticida do perfil do solo para a superfície do mesmo seria $D_a + D_w$. Aplicando o valor de D_E em série aos anteriores, o valor total de D_{Vol} pode ser obtido utilizando a equação:

$$\frac{1}{D_{Vol}} = \frac{1}{D_E} + \frac{1}{D_a + D_w} \quad (1.3.35)$$

ou

$$D_{Vol} = \frac{D_E(D_a + D_w)}{D_E + (D_a + D_w)} \quad (1.3.36)$$

Como $D_{Vol} = k_{Vol} \sum V_i Z_i$ então:

$$k_{Vol} = \frac{D_{Vol}}{\sum V_i Z_i} \quad (1.3.37)$$

Com o parâmetro de reação de lixiviação (D_{Lix}) calculado pela Equação 1.3.7, pode-se obter a equação de k_{Lix} :

$$k_{Lix} = \frac{D_{Lix}}{\sum V_i Z_i} \quad (1.3.38)$$

Com os valores de k_{dis} , obtidos utilizando-se a Equação 1.3.25, e de $J_{L(0)}$ obtido com a Equação 1.3.6, calcula-se o índice de lixiviação (Li), pela Equação 1.3.5.

Os valores de Li variam entre 0 e 1 e quanto maior o valor, maior a probabilidade de lixiviação do pesticida. Bacci e colaboradores (1994) citados por DIA-DIAZ et al. (1999) sugerem uma classificação utilizando os valores de Li quanto ao risco de lixiviação de um pesticida (Lixiviadores, transitórios e não lixiviadores) (Tabela 1.1). Essa classificação foi baseada na frequência e no limite de detecção de pesticidas em água subterrâneas na Itália. Nesse trabalho, essa classificação foi transformada em grau de risco e, ainda, dividida em mais duas outras classes, conforme Tabela 1.1. Deve ficar claro que, na falta de índices que possam classificar o potencial de lixiviação de pesticidas em solos brasileiros, tal adaptação fez-se necessária.

Tabela 1.1 – Classificação da mobilidade de pesticidas no solo quanto ao índice Li

Valores de Li	Classificação Bacci (1994)	Classificação proposta
$0,2 \leq Li \leq 1,0$	Lixiviador	Alto risco
$0,1 \leq Li < 0,2$	Transitório	Médio risco
$0,02 \leq Li < 0,1$		Moderado risco
$0,01 \leq Li \leq 0,02$	Não lixiviador	Baixo risco
$0,0 \leq Li \leq 0,01$		Sem risco

1.3.2. Balanço Hídrico

A equação do balanço hídrico utilizada no modelo para estimar a recarga do lençol freático (R_L) obedece ao princípio da conservação de massa, segundo o qual, em um sistema qualquer, a diferença entre as entradas e as saídas é igual à variação do armazenamento dentro do sistema considerado:

$$R_L = I + Prec - R_{Esc} - ET - \frac{dA_{rm}}{dt} \quad (1.3.39)$$

em que:

- I = irrigação ($L T^{-1}$);
- $Prec$ = precipitação ($L T^{-1}$);
- R_{Esc} = escoamento superficial ($L T^{-1}$);
- ET = evapotranspiração ($L T^{-1}$); e
- A_{rm} = armazenamento ($L T^{-1}$).

Para cálculo de R_{Esc} foi utilizado o método do balanço de água na superfície do solo, proposto por PRUSKI et al. (1993). A evapotranspiração foi calculada utilizando-se os métodos de Penman-Monteith, Blaney-Criddle (FAO) ou do tanque classe 'A' (PEREIRA et al., 1997), conforme a disponibilidade de dados do usuário. O armazenamento foi calculado da seguinte forma:

$$A_{rm} = (\theta_{cc} - \theta_i) d \quad (1.3.40)$$

em que θ_i = teor de água na camada (ou compartimento) no instante em que se inicia o evento chuva ou irrigação. O valor de 'd' é o mesmo utilizado para o cálculo do índice de lixiviação. Toda água que ultrapassar essa profundidade será considerada como recarga do aquífero. O valor de R_L é transformado em $L^3 T^{-1}$, levando em conta a área, para ser utilizado na Equação 1.3.7.

1.3.3. Parâmetros do modelo computacional do índice de lixiviação

Para o cálculo do índice de lixiviação de pesticidas foram consideradas as características físico-hídricas do solo, as físico-químicas do produto e a massa total aplicada, como demonstrado abaixo:

a) Parâmetros do Pesticida

Coeficiente de partição Carbono orgânico normalizado (K_{oc})

Coeficiente de partição (K_d)

Solubilidade em água (S_p)

Pressão de vapor (P_v)

Meia-vida ($t_{1/2}$)

b) Parâmetros do solo

Teor de água na saturação (θ_s)

Teor de água na capacidade de campo (θ_{cc})

Teor de água no ponto de murcha (θ_{pm})

Massa específica do solo (ρ_s)

Massa específica de partículas (ρ_p)

Conteúdo de carbono orgânico (f_{oc})

d) Parâmetros da cultura

Profundidade efetiva do sistema radicular (d)

e) Parâmetros Climatológicos

Elementos climatológicos necessários para o cálculo da evapotranspiração

f) Parâmetros de manejo

Massa total aplicada do pesticida (M_0)

1.3.4. Caracterização do cenário do estudo de caso

Como região de estudo foi utilizado o Distrito de Irrigação do Gorutuba (DIG), situado na bacia do Rio Gorutuba, inserida na junção dos Rios Gorutuba e Mosquito, Norte de Minas Gerais, entre as coordenadas UTM aproximadas de 8.246 km N e 8.273 km N e 677 km E e 687 km E e abrange uma área de 5.286 ha. Os pesticidas considerados no estudo foram aqueles utilizados ou que poderão ser utilizados na cultura da bananeira, cultura essa que ocupa mais de 80% da área plantada do distrito (COMPANHIA DE DESENVOLVIMENTO DO VALE DO SÃO FRANCISCO - CODEVASF, 2003). Os pesticidas selecionados são os mais utilizados no controle de pragas e plantas daninhas na cultura da bananeira, sendo dois inseticidas de solo (Carbofuran, Fonofos), um inseticida foliar (Carbaryl) e um herbicida (Prometrin). Na simulação, considerou-se como massa de pesticida aplicada a dosagem recomendada no rótulo da formulação comercial dos produtos e a frequência que possivelmente seriam aplicados durante um ano. Os parâmetros físico-químicos dos pesticidas utilizados na simulação estão apresentados na Tabela 1.2. Foram também utilizados os parâmetros físico-hídricos de solo (Tabela 1.3) obtidos por VIEIRA et al. (2003) em 14 pontos amostrais, todos georreferenciados dentro do distrito de irrigação (Figura 1.2). Foi considerado para efeito de recarga do lençol freático toda a água que excedesse a profundidade efetiva da cultura da bananeira, isto é, 60 cm. Para o cálculo da recarga do lençol freático foi utilizada a Equação 1.3.39 do balanço hídrico e as normais climatológicas da estação meteorológica do Município de Janaúba.

Tabela 1.2 – Parâmetros físicos e químicos dos pesticidas utilizados na simulação.

Ingred.Ativo	Koc	Peso Molec.	Solubilidade	P. vapor	T_{1/2}
	(m ³ /Kg)	(g/mol)	(g/m ³)	(Pa)	(dia)
Carbofuran	0,02	221	351	0,000080	50
Prometrin	0,04	241	33	0,000170	60
Carbaryl	0,10	303	120	0,000130	50
Fonofos	0,02	201	17	0,000041	15

Tabela 1.3 – Parâmetros físico-hídricos médios da camada de 0 a 100 cm do solo do Distrito de Irrigação Gorutuba utilizados no cálculo do índice de lixiviação

Lote	q_{cc} (x 10 ⁻² cm ³ cm ⁻³)	q_{PM} (x 10 ⁻² cm ³ cm ⁻³)	r_s (g/cm ³)	r_p (g/cm ³)	MO (dag kg ⁻¹)
1	17,5	9,1	1,56	2,65	1,01
2	19,5	12,3	1,35	2,59	1,11
3	24,0	10,9	1,4	2,53	1,37
4	27,0	15,3	1,35	2,63	2,22
5	22,0	13,4	1,43	2,71	1,17
6	14,0	7,3	1,62	2,62	1,11
7	16,0	8,3	1,55	2,62	1,03
8	24,0	15,9	1,29	2,55	1,95
9	18,1	9,4	1,56	2,63	0,83
10	16,9	8,5	1,67	2,61	1,27
11	15,0	8,4	1,45	2,50	1,32
12	21,3	12,5	1,51	2,58	2,01
13	18,3	11,7	1,45	2,60	0,91
14	17,2	10,8	1,54	2,63	0,74

MO – Matéria orgânica

1.3.5. Associação do índice de lixiviação com sistema de informação geográfica (SIG)

O índice de lixiviação foi usado para confeccionar mapas de potencial de lixiviação, em áreas cultivadas do Distrito de Irrigação do Gorutuba, utilizando o sistema de informações geográficas. Para isso, foi feito o georreferenciamento de um mapa do Distrito de Irrigação do Gorutuba, utilizando o software ArcView GIS 3.2a. Importou-se um arquivo no formato DXF do software AutoCAD 2000, sendo então, utilizado como base para digitalização em tela. Foi criada uma base de dados relacional contendo informações das coordenadas geográficas dos pontos de amostragem de solo e o índice de lixiviação gerado pelo modelo computacional. Essa base de dados foi criada numa planilha EXCELTM e importada pelo ArcView 3.2a utilizando, para isso, a interface ODBC (Figura 1.2).

Por meio do banco de dados relacional, foram criados mapas contendo os limites das áreas classificadas, conforme Tabela 1.2.

O software ARCVIEW[®] foi a estrutura de SIG utilizada nesse trabalho, porém, qualquer outro pacote de SIG que possua interface com banco de dados relacional pode ser utilizado.

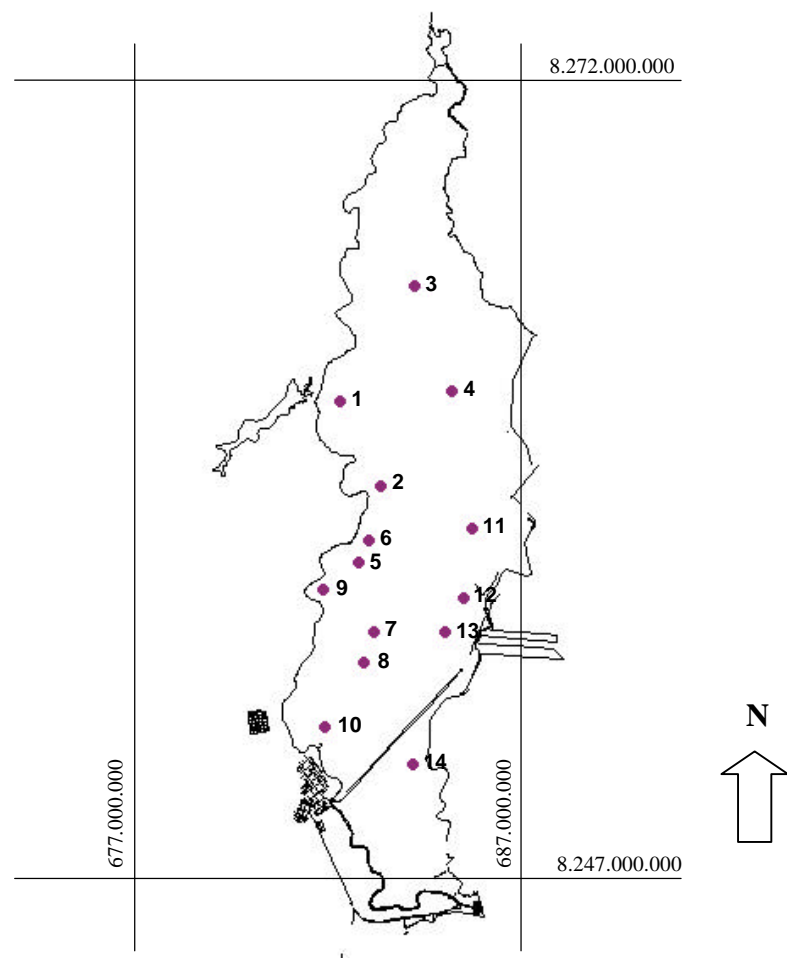


Figura 1.2 – Distrito de irrigação do Gorutuba e a representação dos 14 pontos amostrais georreferenciados.

1.4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

1.4.1. Programa desenvolvido

O Programa computacional para o cálculo do índice de lixiviação e de transporte de pesticidas no solo foi denominado “HIDROSOLO”. O programa apresenta várias interfaces mostradas nas Figuras 1.3 a 1.13, sendo estruturado em módulos, de fácil utilização e, após a confirmação do preenchimento de cada formulário, as escolhas feitas pelo usuário são apresentadas, de forma resumida, num painel situado ao lado esquerdo da tela principal (Figura 1.3). Na tela principal, estão apresentados os módulos: Arquivo, Cadastro, Cenário, Modelos, Dados de entrada, Condições Iniciais e de Contorno, Parâmetros da simulação, Calcular, Resultados e Ajuda. Entretanto, serão apresentados neste capítulo apenas os módulos relacionados ao cálculo do potencial de risco de contaminação de águas subterrâneas.

No módulo ‘Cadastro’ são armazenadas informações na forma de um banco de dados aberto, dos principais componentes ambientais que caracterizarão o cenário a ser simulado. Estes componentes ambientais estão representados pelo Pesticida, Solo, Cultura e Clima.

No componente ‘Pesticida’, é possível armazenar informações referentes às propriedades físicas, químicas e de um esquema da estrutura molecular do composto químico, identificado pelo nome de seu princípio ativo, grupo químico e classe. As informações necessárias para o preenchimento deste formulário estão apresentadas na Figura 1.4.

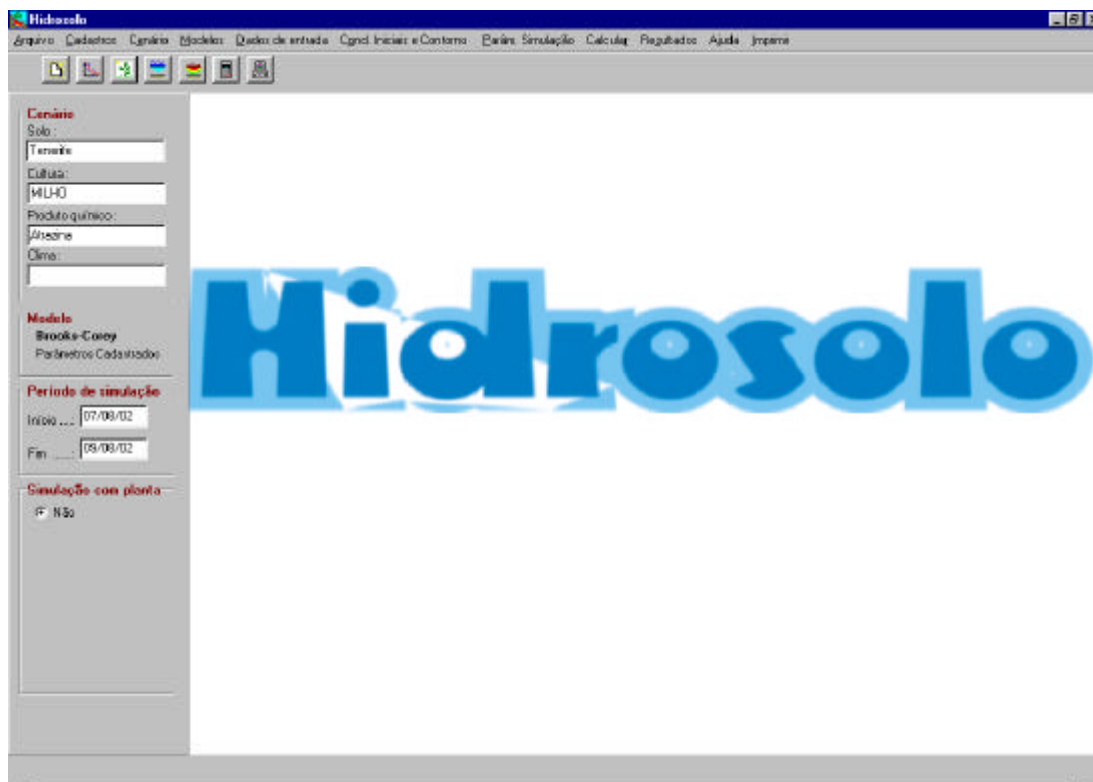


Figura 1.3 – Tela principal do modelo HIDROSOLO.

Figura 1.4 – Formulário de cadastro de pesticidas.

No componente ‘Solo’, além da identificação e do local em que se situa o solo, há uma interface onde são armazenados dados referentes à superfície do mesmo (Figura 1.5), podendo, ainda, ser dividido em várias camadas com armazenamento de

parâmetros físico-hídricos, químicos, textural e de ajuste da curva de retenção de água no solo (Figura 1.6).

Figura 1.5 – Formulário de cadastros das propriedades da superfície do solo

Figura 1.6 – Formulário de cadastros das propriedades físico-hídricas, químicas, textural e de ajuste da curva de retenção.

No componente ‘Planta’, é possível armazenar informações referentes ao crescimento da cultura, crescimento e densidade radicular, e o coeficiente da cultura (Kc) (Figura 1.7).

Figura 1.7 – Formulário de cadastro de culturas

No cadastro ‘Clima’ (Figura 1.8), o usuário poderá entrar com as informações diariamente ou importar dados por meio de arquivo com extensão “.TXT”, desde que o formato seja o padrão INMET, porém sem as colunas de direção de vento (Figura 1.9). Uma vez escolhida a opção de importar dados, o formulário ‘Clima’ (Figura 1.8) será preenchido apenas com as médias compensadas para os elementos climáticos que, assim, se fizerem necessários. O cabeçário e a linha em branco estão apresentados na Figura 1.9 apenas em caráter didático, mostrando a ordem em que esse arquivo deverá ser montado, não podendo constar no arquivo a ser importado.

Figura 1.8- Formulário de cadastro do clima

O modelo HIDROSOLO permite uma flexibilidade de uso, podendo o usuário, rapidamente, alterar o cenário a ser avaliado. Isso pode ser feito utilizando o módulo ‘Cenário’, onde serão feitas as escolhas dos elementos os quais compõem o ambiente (Figura 1.10).

1.4.2. Estudo de caso

Foram cadastrados todos os parâmetros dos 14 pontos amostrais do Distrito de Irrigação do Gorutuba apresentados na Tabela 1.3 e dos pesticidas apresentados na Tabela 1.2. Uma vez digitalizados esse pontos amostrais e calculado os índices pelo HIDROSOLO, confeccionou-se mapas de potencial de risco de contaminação das águas subterrâneas, utilizando o método de interpolação de Kriging (Figura 1.13.)

JANAUBA2002.txt - Bloco de notas		Arquivo		Pesquisar		Ajuda																
Dia	Mes	Ano	P12	P18	P24	TBS12	TBS18	TBS24	TBU12	TBU18	TBU24	Tmax	Tmin	UR12	UR18	UR24	UU12	UU18	UU24	Prec	Evaipo	Inso1
1	1	2002	931.8	927.8	931.6	22.2	28.6	19.8	21.4	23.8	19	29.8	20	92	66	93	3	0.7	1.3	11.7	1	3.2
1	2	2002	930.8	928.7	930.4	22	25.6	20	21	24.2	19	28.2	19.5	91	89	91	0.7	0.3	0.3	24.4	1.7	2.4
1	3	2002	929.8	926	930	23.6	31.2	22.8	22	24.4	21.4	31.8	18	86	56	88	0.7	0.7	0.8	6.8	1.7	6.5
1	4	2002	930.6	930	933.5	24.6	29	22.8	22.2	23.2	21	30.4	19.5	81	59	85	0.7	5	0	2.4	2.8	8.3
1	5	2002	936.6	935	935.8	23.8	26	21.8	21	21.8	20.2	30	21	75	67	86	2.5	0.8	0	0.3	1.7	5.7
1	6	2002	936.7	932.8	932.8	24.8	26.6	21.8	20.4	22.2	20.4	29.6	18	66	56	88	2.5	2.3	0.5	0	2	10.7
1	7	2002	936.8	932.8	935.4	23.6	26.8	23	20.6	22	20.8	28	21	75	65	81	2.5	0.5	0	0	3.6	5.3
1	8	2002	935.9	934.2	936.6	23.2	28.4	23.8	20	22.5	21.2	29.2	20	74	59	79	3.6	3.3	2	0	2.9	7.2
1	9	2002	939.2	937.9	938.2	24.8	28.8	24	21.6	23	21	29.2	18.5	74	60	75	2.3	0.8	0.8	0	3	7.7
1	10	2002	941.2	938.2	941.9	22.6	26	20.8	19.8	21.6	19.4	27	17.5	76	66	87	0.3	0.7	0.5	0	3	3.8
1	11	2002	934.1	940.8	941.9	22.2	24.8	20.8	19.8	20.8	19.6	26	19.5	79	69	89	1.3	0.8	1.3	0	2	0.5
1	12	2002	941.8	938.4	939.6	21.4	24.8	19.4	20	21.8	19	26	19.5	87	75	97	1.6	0.8	0.8	14.6	2	0
1	13	2002	938.7	936.2	935.9	20.6	21.4	20.6	19.6	20	19	22	19	91	87	93	1.5	1.3	0	1.9	1.2	0
1	14	2002	933.1	928	929.4	20.8	22.6	20.2	19.8	21	20	24.8	19.4	91	86	98	3	2.1	0.8	34.9	0.8	0.1
1	15	2002	926.6	924.8	928.7	24	28.4	19.8	22	24	19	29	20	83	69	93	1.3	2.1	0	22.3	0.7	3.6
1	16	2002	928.7	926.6	930.4	23.4	28.2	20.4	20.6	23.5	18	30	19	77	67	78	1.6	1.3	0	36.4	2.3	9.7
1	17	2002	934.7	930.2	934	21.6	26.2	20.8	17.6	22	20.8	27.8	17.5	67	68	93	2.5	0.3	0	0	3.3	4.8
1	18	2002	937.2	934.7	934.7	19.8	20.6	19	18	19.8	18.8	21	16.8	83	93	98	1	0.3	0.8	12.2	4.5	0
1	19	2002	937.8	936	938.4	19.8	23.6	21	19.4	18	20.4	25	18.8	96	80	94	0	0.8	0.3	20.9	0.8	0
1	20	2002	939.6	937.4	936.8	24	28.8	22.2	21	21.8	20	30	19.5	75	53	81	3.3	2	0.7	1.8	0.8	10.6
1	21	2002	938.6	937.1	938.6	23.6	29.4	21.4	21	21.2	20	30	17.5	78	46	87	1.3	1.8	0.3	0	6.6	12
1	22	2002	940.7	937.5	937.6	24	29.6	21.8	21.2	23	20.4	31	17.5	77	56	88	2.5	3.3	0.8	0	4.2	12.1
1	23	2002	938.4	935.4	936.3	24.4	29.8	23.8	21.2	23	20.4	30.4	18	74	55	85	2.1	1.6	0	0	4	4.7
1	24	2002	936.4	932.8	935.1	24.6	24.8	21.6	22.4	21.8	20.8	31	20	82	75	93	1.3	0.7	1.3	1.1	3.2	5.7
1	25	2002	935.9	933.9	935.4	22	27.8	22.6	20.4	23.2	22	28	18.8	86	67	95	2.1	2.1	0.3	17.5	2.2	3.1
1	26	2002	936.3	933.9	936.4	22	29	21.2	21	23.4	20.6	23	19	91	61	94	0.5	3.5	0.3	25.3	0.5	2.8
1	27	2002	935.5	931.5	935	23.8	29.6	20.8	21.8	24.2	20.6	31.2	20	83	63	87	1	0.7	0.7	25.9	0.9	7.8
1	28	2002	933.2	931.5	932.4	24.6	28.4	21.6	23	23.6	20.6	30.2	19	88	67	91	2.5	2	0.5	4.9	2.6	4.4
1	29	2002	933.2	931	934.4	25	31.2	23.8	22.4	24.6	21.4	31.8	19.5	79	58	80	2.3	2	1.3	0	2	9
1	30	2002	935.5	932.7	935.1	22.4	29.4	20.6	21.6	24.2	19.4	30.4	20.4	93	65	89	0.8	1.3	0.3	0.3	2.7	2.9
1	31	2002	934.7	931.5	935.2	21	28	24	19.8	22.8	22	29.2	18.5	89	63	83	2	3.3	1	4.5	1.5	8.6

Figura 1.9 – Formato do arquivo TXT para preenchimento do formulário de ‘Clima’ via importação de dados (Obs. As duas primeiras linhas não poderão constar no arquivo a ser importado).

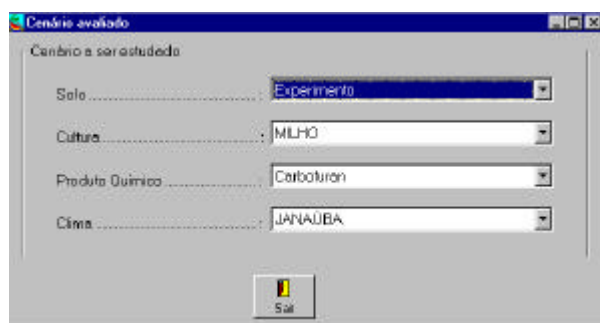


Figura 1.10 – Escolha do cenário a ser avaliado

Uma vez escolhido os elementos do cenário a ser avaliado o usuário terá a opção de calcular a recarga do aquífero ou fornecer diretamente esse dado ao modelo (Figura 1.11). Caso a primeira opção seja escolhida, o local a ser avaliado deverá possuir os dados climatológicos devidamente preenchidos no banco de dados do clima.

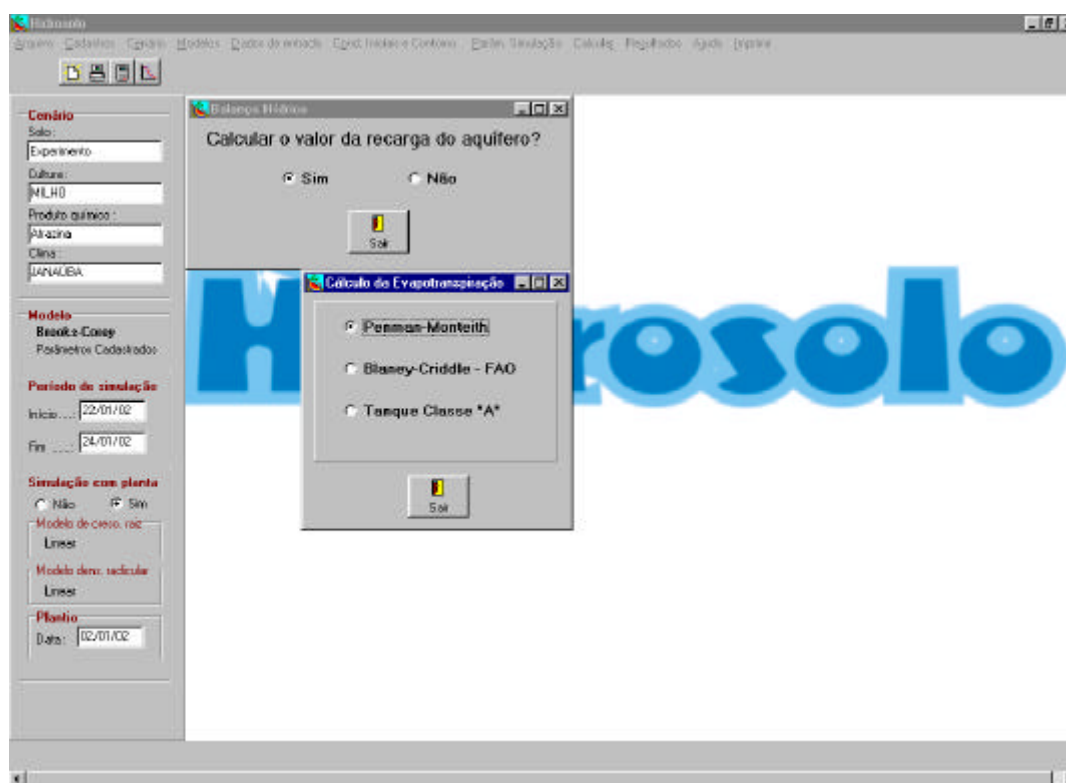


Figura 1.11 – Escolha a ser feita pelo usuário quanto ao cálculo da recarga do aquífero

Escolhidas todas as opções, o índice do potencial de risco de contaminação das águas subterrâneas é rapidamente calculado (Figura 1.12) bastando apenas

fornecer a massa aplicada do pesticida. A classificação quanto ao risco de contaminação, baseada na Tabela 1.1, também é fornecida.

The screenshot shows a software window titled "Potencial de risco de contaminação de aquífero". The interface is divided into a sidebar on the left and a main panel on the right. The sidebar contains several sections: "Cenário" with fields for "Solo" (Espessura, Cultiva: MILHO, Produto químico: Alacore, Clima: JANALBA), "Modelo" (Brooks-Casey, Parâmetros Ceditados), "Período de simulação" (Início: 22/01/02, Fim: 24/01/02), "Simulação com planta" (radio buttons for Não and Sim, selected Sim; Modelo de crescimento: Linear), and "Planta" (Data: 02/01/02). The main panel has a title bar and contains the following fields: "Recarga anual do aquífero" (0,001746 m/dia.ano), "Massa aplicado no ano" (0,08 kg/m²), "Índice de Lixiviação" (0,766001496327274 nds), and "Classificação de risco" (Alto Risco). At the bottom of the main panel are "Calcular" and "Sair" buttons. A large blue watermark "Solo" is visible in the background of the main panel.

Figura 1.12 – Formulário onde se obtém o índice de potencial de risco.

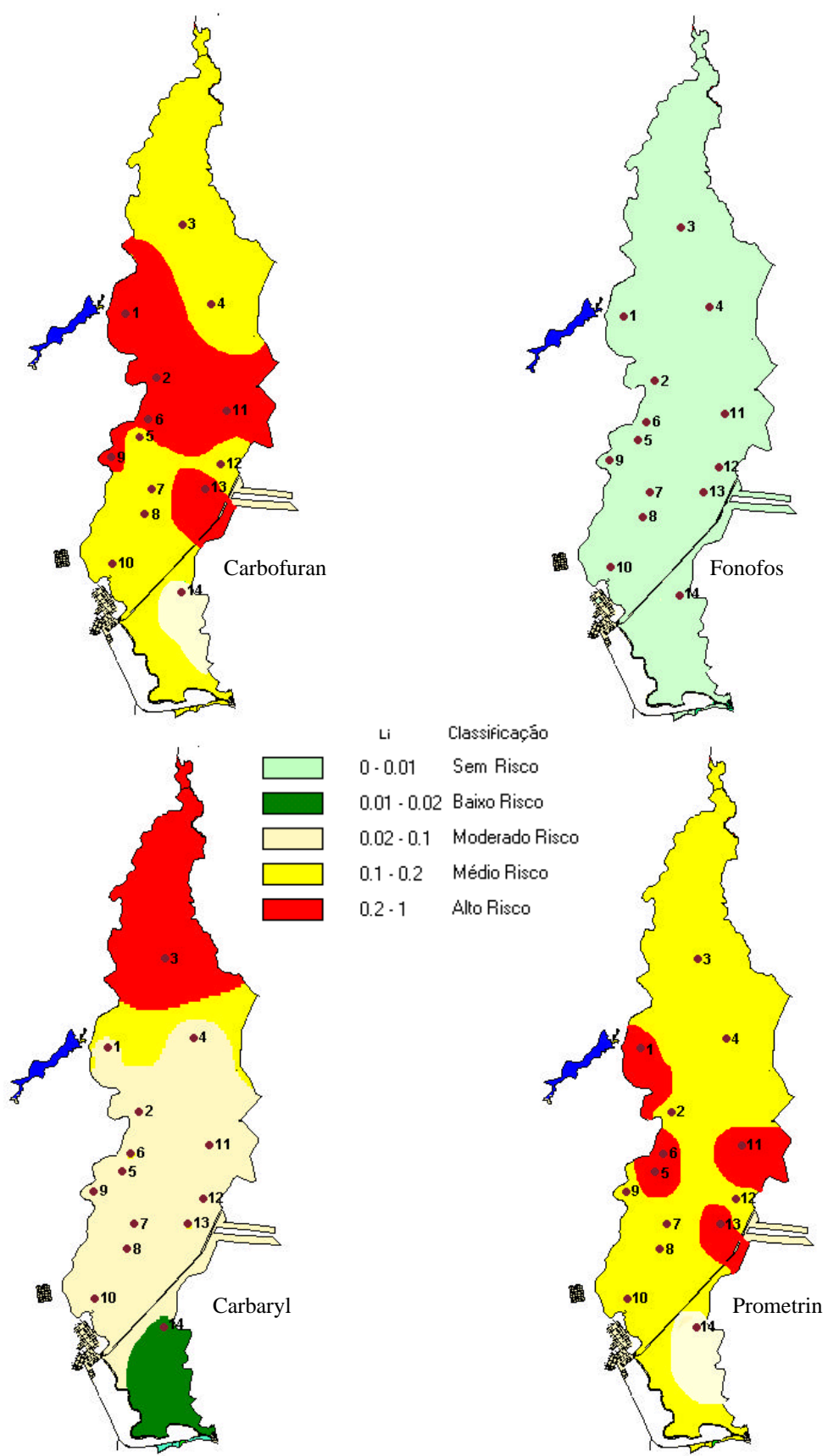


Figura 1.13 – Mapas de potenciais de risco de contaminação das águas subterrâneas para os quatro pesticidas utilizados na simulação

O modelo HIDROSOLO juntamente com o SIG possibilitou delimitar as áreas dentro do Distrito de Irrigação do Gorutuba quanto ao potencial de risco de um determinado pesticida atingir o lençol freático.

Pela Figura 1.13, observa-se uma grande variação do índice de lixiviação na área analisada, não só entre os pesticidas utilizados nas simulações, mas também entre o mesmo composto, considerando os 14 pontos amostrais. Exceção ocorre com o Fonofos, inseticida de solo. A grande variação observada nos 14 pontos se deve, entre outros fatores, à presença, dentro do distrito de irrigação, de um grande número de classes de solo o que, conseqüentemente, proporcionou uma variação das propriedades físico-hídricas levantadas (Tabela 1.3). Segundo o Levantamento de Aptidão para Irrigação e Mapeamento Pedológico realizado pela CODEVASF (1978), o Distrito de Irrigação do Gorutuba apresenta solos, que, pelo antigo sistema de classificação de solos, foram classificados como Areia Quartzosa, Aluviais Arenosos, Aluviais Francos, Aluviais Argilosos, Latossolo Eutróficos e Latossolos Distróficos.

O Carbofuran apresentou os mais elevados índices de lixiviação e para o maior número de pontos, mostrando ser um produto com alto potencial de contaminação de águas subterrâneas. Resultados semelhantes também foram obtidos por diversos pesquisadores, quando avaliaram a lixiviação do Carbofuran no solo utilizando outros índices de lixiviação (YEN et al. 1997; DIAZ-DIAZ et al. 1999; DIAZ-DIAZ e LOAGUE, 2000).

A representação do potencial de contaminação das águas subterrâneas, apresentada pelo pesticida Prometrim (Figura 1.13), se assemelha ao apresentado pelo Carbofuran, porém, com uma menor área considerada de alto risco. Já o Carbaryl foi o pesticida que apresentou a maior variabilidade dos índices de lixiviação para os 14 pontos amostrais. Entretanto, considerando o grande número de pontos com índices classificados como de moderado risco, esse pesticida mostrou-se menos problemático que o Carbofuran e o Prometrim.

O Fonofos apresentou os mais baixos índices de lixiviação, sendo classificado como um produto sem risco de contaminação de água subterrânea, conseqüentemente de uso mais seguro.

A variabilidade dos índices de lixiviação apresentada entre os pesticidas pode ser explicada, em parte, pelas suas propriedades físico-químicas. Pelo Tabela 1.2 observa-se uma grande diferença entre os valores de solubilidade (S_p),

principalmente entre o Carbofuran e o Fonofos, e na meia-vida ($t_{1/2}$) entre o Prometrim e o Fonofos. O Carbaryl apresentou o valor do coeficiente de partição carbono-água em torno de cinco vezes maior que os demais, indicando uma maior retenção na fração orgânica do solo.

A pressão de vapor (P) refere-se à tendência de volatilização do pesticida no seu estado normal puro (sólido ou líquido) sendo função direta da temperatura. Pesticidas com valores de $P > 10^0$ Pa (medidos à temperatura ambiente) são considerados muito voláteis; $10^{-2} < P < 10^{-1}$ Pa mediamente voláteis; $10^{-5} < P < 10^{-3}$ Pa pouco voláteis e $P < 10^{-6}$ não voláteis (REGITANO, 2002). Assim, todos os pesticidas utilizados nesse trabalho são classificados como pouco voláteis, tendo esse parâmetro pouca influência nos índices obtidos.

Dos parâmetros apresentados na Tabela 1.2 a solubilidade é um dos mais importantes pois afeta diretamente a sua capacidade sortiva e a mobilidade nos solos. A alta solubilidade do Carbofuran com relação aos outros pesticidas apresentados na Tabela 1.2 proporcionou altos índices de potencial de risco (Figura 1.13), demonstrando a sua maior susceptibilidade à movimentação, ou seja, à lixiviação no solo. O raciocínio inverso pode ser feito para o Fonofos.

O valor de meia-vida ($t_{1/2}$) influenciou nos índices de potenciais de risco obtidos nesse trabalho. O parâmetro meia-vida expressa o tempo em que 50 % da quantidade aplicada do pesticida é dissipado de alguma forma. O termo dissipação é bastante abrangente e refere-se às frações do pesticida que encontram-se nas formas “inativas” e/ou “perdidas” em formas distintas àquela da forma original. A dissipação abrange os processos de mineralização, degradação formação de resíduo ligado, absorção e transporte (REGITANO, 2002). Assim, o menor valor de $t_{1/2}$ do Fonofos contribuiu para a obtenção de menores valores dos índices do potencial de risco.

O coeficiente de partição para o carbono orgânico (K_{oc}) é a normalização do coeficiente de sorção linear (K_d) em função do conteúdo de carbono orgânico do solo. O coeficiente K_d refere-se à relação entre a fração sorvida e a fração em solução de uma determinada molécula no solo. Desta maneira, para um mesmo conteúdo de carbono orgânico no solo, quanto maior o valor de K_d , maior a proporção do pesticida disponível na solução do solo e, portanto, maior sua mobilidade potencial (PRATA e LAVORENTI, 2002). No caso dos pesticidas analisados não se pode fazer inferências diretas sobre esse parâmetro nos valores dos

índices de potencial pois os mesmos apresentaram valores muito próximos do Koc, com exceção do Carbaryl com valores cinco vezes maior.

Na Tabela 1.4 está apresentada a classificação textural dos 14 pontos amostrais, o tempo decorrido da aplicação do pesticida até a amostragem e uma comparação entre os índices calculados pelo HIDROSOLO com a profundidade em que foi encontrado resíduo para o Carbofuran dentro do Distrito de Irrigação do Gorutuba por VIEIRA et al. (2003).

Tabela 1.4 – Dados referentes a aplicação do Carbofuran, lâmina percolada e a classificação do risco de contaminação de água subterrâneas no 14 lotes do distrito de irrigação do Gorutuba.

Lote	Classificação Textural	TAP (meses)	Perc. (mm)	Prof. Resíduo (cm)	Li (ads)	Classificação do risco
1	Fr. arenoso	12	7,87	0	0,263	Alto
2	Fr. argilo arenoso	9	4,95	20	0,257	Alto
3	Fr. argiloso	7	0,36	20	0,164	Médio
4	franco	12	1,28	0	0,131	Médio
5	franco	6	38,77	60	0,170	Médio
6	Fr. siltoso	4,5	0	60	0,217	Alto
7	Fr. siltoso	12	0	0	0,175	Médio
8	Fr. argiloso	3	0	20	0,140	Médio
9	Fr. arenoso	8	2,74	0	0,278	Alto
10	Fr. siltoso	8	5,68	0	0,166	Médio
11	Fr. siltoso	12	1,11	0	0,202	Alto
12	Fr. argiloso	3	5,46	60	0,172	Médio
13	Fr. arenoso	4	4,70	60	0,275	Alto
14	Fr. arenoso	3	9,92	60	0,079	Moderado

TAP – tempo decorrido da aplicação do Carbofuran em relação à data de amostragem,

Perc. – lâmina percolada obtida na avaliação dos sistemas de irrigação.

Confrontando os dados da coluna referente a profundidade em que foi encontrado resíduo de carbofuran e a coluna de classificação de risco de contaminação de águas subterrâneas, verifica-se que não houve uma total

concordância entre os resultados. Porém, a aparente divergência entre a classificação de risco e a profundidade em que foi encontrado o resíduo de Carbofuran pode ser explicada pelo tempo de aplicação do pesticida. Verifica-se, pela Tabela 1.4, que, nos lotes que obtiveram a classificação para o Carbofuran como sendo de alto risco e não foi detectado resíduo algum, o tempo de aplicação do pesticida foi relativamente alto comparado com a meia-vida do produto. Já a divergência para os lotes 5 e 14 pode ser explicada pelo excesso de água de percolação, uma vez que VIEIRA et al. (2003) também avaliaram o manejo da irrigação desse lotes.

A variabilidade apresentada pela simulação mostrou a importância de se considerar a interação pesticida-solo nos diversos compartimentos do ambiente inseridos dentro do sistema analisado, mostrando que a utilização apenas de parâmetros específicos do pesticida ou mesmo do solo não são suficientes para se classificar um composto quanto ao seu potencial de contaminação do ambiente.

Outro estudo de caso, utilizado para avaliar o índice de lixiviação, foi baseado no trabalho realizado por VIEIRA et al. (2000). Nesse trabalho, os autores estudaram o efeito de várias lâminas de irrigação na movimentação no perfil do solo de dois inseticidas de tratamento de sementes, o Carbofuran e o Thiodicarb, até uma profundidade de 50 cm. Cadastrando no HIDROSOLO as informações do clima, lâminas aplicadas na irrigação e das propriedades físico-hídricas do solo da área experimental, verificou-se que o ‘Li’ foi satisfatório para classificar os dois inseticidas quanto ao potencial de lixiviação (Tabela 1.5).

Tabela 1.5 – Características do solo da área experimental obtidos por VIEIRA et al. (2000) e o índice de lixiviação calculado pelo HIDROSOLO

Ingrediente ativo	r_s g cm ⁻³	r_p g cm ⁻³	qcc $\times 10^{-2}$ cm ³ cm ⁻³	MO dag kg ⁻¹	Prof. resíduo cm	Li ads	Classif. de Risco
Carbofuran	1,01	2,55	0,37	3,5	50	0,247	Alto risco
Thiodicarb	1,01	2,55	0,37	3,5	20	0,029	Baixo Risco

VIEIRA et al. (2000) verificaram que o Carbofuran não só foi detectado nas maiores profundidades, mas também em maiores quantidades ao longo do perfil do solo, quando comparado com o Thiodicarb.

Os mapas gerados pelo ARCVIEW[®] resultaram da interpolação dos índices calculados pelo HIDROSOLO. Uma melhor representação da potencialidade de contaminação da área analisada poderia ser obtida caso o mapa utilizado na digitalização apresentasse a delimitação e identificação das principais classes de solo do distrito de irrigação. Assim, considerando que solos com a mesma taxonomia apresentariam valores de propriedades físicas e químicas, também similares, o mapa final não seria, somente, resultado de interpolações dos valores do índice de lixiviação entre os pontos amostrados, mas sim, uma representação mais real da condição de campo em termos da distribuição dessa classificação de risco.

Caso órgãos públicos e privados que administram perímetros irrigados usassem os mapas de potencialidades de risco para orientar produtores quanto ao risco de contaminação das águas subterrâneas, a sustentabilidade das atividades agrícolas seriam grandemente implementadas.

O uso do modelo HIDROSOLO associado à tecnologia do sistema de informações geográficas permitiu armazenar e manipular uma variedade de dados necessários para calcular o índice de lixiviação de contaminantes não pontuais em escala regional. Entretanto, a integração do índice de lixiviação ao SIG, associando a informações de atributos fisiográficos, com geologia, solos, profundidade do lençol freático e outros, faria do HIDROSOLO uma ferramenta ainda mais poderosa no que tange à avaliação e ao delineamento de áreas com riscos potenciais e até mesmo na definição de um programa de monitoramento de contaminação das águas subterrâneas.

É importante ressaltar que a classificação do potencial de risco de contaminação de águas subterrâneas utilizada nesse trabalho refere-se apenas à possibilidade de percolação no perfil do solo de uma substância, podendo ou não atingir o lençol freático, onde haja as condições favoráveis para que isso ocorra. Com isso, os mapas gerados pelos índices de lixiviação possibilitam, não só delimitar áreas com certa vulnerabilidade a um determinado produto, mas fazer com que esse produto seja aplicado com mais critério, dentro de uma estratégia de manejo melhor delineada, caso esse pesticida, seja indispensável na exploração de uma determinada cultura dentro dessa área.

Devido à inexistência de dados, no Brasil, que possam gerar informações suficientes para se formular uma classificação de índices de lixiviação de pesticidas no solo, torna-se necessário criar instrumentos para, num primeiro momento, tornar

possível uma avaliação da evolução da qualidade das águas subterrâneas em relação aos níveis já estabelecidos. Porém, um esforço deve ser feito para se criar critérios, com base científicas, que possibilitem formular uma classificação de potencial de risco de contaminação de águas subterrâneas considerando as características edafoclimáticas do Brasil.

Apesar da classificação do índice de lixiviação utilizada nesse trabalho ser de origem italiana, sua utilização no Brasil é válida, embora as características dos solos Italianos sejam diferentes das dos solos brasileiros, pois as propriedades utilizadas no cálculo do Li são inerentes a qualquer solo, tornando a classificação válida no país.

1.5. RESUMO E CONCLUSÕES

Neste trabalho, desenvolveu-se um modelo computacional para calcular o índice de lixiviação de pesticidas utilizando o conceito de fugacidade e considerando as características físico-hídricas do solo, parâmetros físico e químicos do pesticida e dados climatológicos. O modelo, desenvolvido em DEPHI 3.0 e denominado HIDROSOLO, foi usado para calcular índices de lixiviação para três inseticidas (Carbofuran, Prometrin e Carbaryl) e um herbicida (Fonofos) utilizados pelos produtores rurais no Distrito de Irrigação do Gortuba (DIG), Município de Janaúba, Norte de Minas Gerais. A partir dos índices calculados para 14 pontos de amostragem dentro do distrito, foram gerados mapas contendo os limites das áreas classificadas como sendo de sem, baixo, moderado, médio e alto potencial de risco de contaminação de água subterrâneas. A análise dos resultados obtidos permite concluir que:

- o programa computacional revelou ser uma ferramenta valiosa e de fácil utilização na caracterização de áreas com potenciais de riscos de contaminação de águas subterrâneas, fornecendo subsídios para o planejamento de ações de controle ambiental;

- o modelo possibilita a identificação do grau de risco de contaminação de aquíferos por pesticidas, considerando várias condições edafo-climáticas.
- a utilização de parâmetros específicos seja do pesticida ou do solo, de forma isolada, não é suficiente para se classificar um composto quanto ao seu potencial de contaminação do ambiente.
- Os resultados comprovam a validade da associação da modelagem matemática e do sistema de informações geográficas para fins previsionais, em escala regional, pesticidas.

1.6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGRAWAL, G. D. Diffuse agricultural water pollution in India. **Water Science and Technology**, v. 39, Issue 3, 1999, p. 33-47.

BACCI, E. **Ecotoxicology of organic contaminants**. Lewis Publishers, New York, 1994, 165 p.

BACCI, E., GAGGI, C., Simple models for ranking pesticide mobility from soils. In: DEL RE, A., CAPRI, E., EVANS, S.P., NATALI, P., TREVISAN, M.P. **Proceedings of the IX Symposium on Pesticide Chemistry, Mobility and Degradation of Xenobiotics**, Edizione Biaggini, Lucca, Italy, p. 209–219. 1993.

BANDARANAYAKE, W. M.; BUTTERS, G. L.; HAMDI, M.; PRIENKSAT, M.; ELLSWORTH, T. R. Irrigation and tillage management effects on solute movement. **Soil and tillage research**, v.48, 1998, p.165-173.

BENGTSON, R.L., SOUTHWICK, L.M., WILLIS, G.H., CARTER, C.E. The influence of surface drainage practices on herbicide losses. **Transactions of the ASAE**, v.33, n.2, p.415-418, 1990.

BOLLAG, J. M.; LIU, S. Y. Biological transformation processes of pesticides. In: CHENG, H. H. **Pesticides in the soil environment: processes, impacts and modeling**. Madison: **Soil Science Society of America**, 1990, p.169-212.

BOUMAN, B. A. M.; CASTAÑEDA; A. R.; BHUIYAN, S. I. Nitrate and pesticide contamination of groundwater under rice-based cropping systems: past and current evidence from the Philippines. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v.92, Issues 2-3, 2002, p.185-199.

CHENG, H.H. Pesticides in the soil environment-an overview. In: CHENG, H. H. **Pesticides in the soil environment: Processes, impacts and modeling**. Madison: Soil Science Society of America. 1990. p.1-5.

COMPANHIA DE DESENVOLVIMENTO DO VALE DO SÃO FRANCISCO. **Levantamento de aptidão para irrigação e mapeamento pedológico**. Brasília - DF, 1978, 78 p.

COMPANHIA DE DESENVOLVIMENTO DO VALE DO SÃO FRANCISCO. O projeto Gorutuba. Brasília - DF, 2003. Disponível em: http://www.codevasf.gov.br/produtos/pro_gorutuba.htm. Acesso em: 28/04/2003.

DIAZ-DIAZ, R.; LOAGUE, K.; Regional-scale leaching assessments for Tenerife: effect of data uncertainties. **Journal Environmental Quality**. v. 29, p. 835-847, 2000.

DIAZ-DIAZ, R.; LOAGUE, K.; NOTARIO, J. S. An assesment of agrochemical leaching potentials for Tenerife. **Journal of Contaminant Hydrology**. v. 36, p. 1-30, 1999.

DONOSO, G.; CANCINO, J.; MAGRI, A. Effects of agricultural activities on water pollution with nitrates and pesticides in the Central Valley of Chile. **Water Science and Technology**, v. 39, Issue 3, 1999, p. 49-60.

ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **Agricultural chemical in groundwater: proposed pesticide strategy**. Washington, D. C.: Office of pesticides and toxic substances. v.16 p.,1987.

FERREIRA, C. R. R. P. T. Defensivos agrícolas: situação do mercado. **Informações Econômicas**, SP, v.30, n.10, out. 2000.

FILIZOLA, H. F.; FERRACINI, V. L.; SANS, L. M. A. Monitoramento e avaliação do risco de contaminação por pesticidas em água superficial e subterrânea na região de Guaíra. **Pesq. Agropec. Bras.**, maio 2002, vol.37, no.5, p.659-667.

FINIZIO, A.; VILLA, S. Environmental risk assessment for pesticides – A tool for decision making. **Environmental Impact Assessment Review**, n.22, p.235-248, 2002.

FOOD AND AGRICULTURE ORGANIZATION. **Control of water pollution from agriculture**. FAO, Irrigation and Drainage Paper 55, Rome, 101p., 1996.

GIRODO, A. C. Noções de hidrologia/hidrogeologia e elementos básicos de água subterrânea. In: **II Encontro de Preservação de mananciais da Zona da Mata Mineira**. Viçosa, ABAS, ABEAS, UFV. 2002. p. 433-462.

GISH, C.J., ISENSEE, A.R., NASH, R.G. Impact of pesticides on shallow groundwater quality. **Transactions of the ASAE**, v.34, n.4, p.1745-1753, 1991.

GUSTAFSON, D. I. Groundwater ubiquity score: a simple method for assessing pesticide leachability. **Environmental Toxicology and Chemistry**. V.8, p. 339-359,1989.

HARIA, A. H. MARTIN; HODNETT, G.; JOHNSON, A. C. Mechanisms of groundwater recharge and pesticide penetration to a chalk aquifer in southern England, **Journal of Hydrology**, v.275, Issues 1-2, 2003,p.122-137.

INSTITUTO BRASILEIRO DE ESTATÍSTICA E GEOGRAFIA. **Censo agropecuário 1998/1999**. Levantamento sistemático da produção agrícola.1999.

INSTITUTO BRASILEIRO DE ESTATÍSTICA E GEOGRAFIA. Agropecuária, 2001 Disponível em: <http://www.ibge.gov.br/brasil_em_sintese/tabelas/tabelas_agropecuaria.htm> Acesso em 28/07/2003.

ISENSEE, A.R., NASH, R.G., HELLING, C.S. Effect of conventional vs no-tillage on pesticide leaching to shallow groundwater. **Journal Environmental Quality**. v.19, p.434-440, 1990.

JOHNSON, A. C.; BESIEN, T. J.; BHARDWAJ, C. L.; YONG, L.; JIABAO, Z.; DIXON, A.; GOODDY, D. C.; HARIA, A. H.; WHITE C. Penetration of herbicides to groundwater in an unconfined chalk aquifer following normal soil applications. **Journal of Contaminant Hydrology**, v.53, Issues 1-2, 2001, p. 101-117.

JURY, W. A.; GARDNER, W. **Soil physics**. New York: John Wiley & Sons. 1991. 328p.

JURY, W. A.; SPENCER, W. F.; FARMER, W. J. Behavior assessment model for trace organics in soil: I Model description. **Journal Environmental Quality**. V.12, n.4, 1983, p.558-564.

JURY, W. A.; SPENCER, W. F.; FARMER, W. J. Behavior assessment model for trace organics in soil: II Chemical classification and parameter sensitivity. **J. Environmental Quality**. V.13, n.4, 1984, p.567-572

JURY, W. A.; SPENCER, W. F.; FARMER, W. J. Behavior assessment model for trace organics in soil: III Application of screening model. **Journal Environmental Quality**. v.13, n.4, 1984b, p.573-579

KOSKINEN, W. C.; HARPER, S. S. The retention process: Mechanism. In: CHENG, H. H. Pesticides in the soil environment: Processes, impacts and modeling. Madison: **Soil Science Society of America**. 1990. p.51-77.

LOAGUE, K.; YOST, R. S.; GREEN, R. E.; LIANG, T. C. Uncertainty in a pesticide leaching assessment for Hawaii. **Journal of Contaminant Hydrology**. N.4, p. 139-161, 1989.

MACKAY, D. **Multimedia environmental models, the fugacity approach**. Lewis Publishers, New York, 1991, 257 p.

MACKAY, D; PATERSON, S. Calculating fugacity. **Environmental Science & Technology**, v.15, n.9, September, p.1006-1014, 1981.

MACKAY, D; PATERSON, S. Fugacity revisited. **Environmental Science & Technology**, v.16, n.12, p.654A-660A, 1982.

MANOEL FILHO, J. Ocorrência das águas subterrâneas. In: FEITOSA, F. A. C.; MANOEL FILHO, J. **Hidrogeologia – conceitos e aplicações**. Fortaleza: CPRM, 1997a, 412p.

MANOEL FILHO, J. Contaminação das águas subterrâneas. In: FEITOSA, F. A. C.; MANOEL FILHO, J. **Hidrogeologia – conceitos e aplicações**. Fortaleza: CPRM, 1997b, 412p.

MEEKS, Y. J.; DEAN, J. D. Evaluating ground-water vulnerability to pesticides. **Journal of water resources planning and management**. V.116, n.5, p693-707, 1990.

NATIONAL RESEARCH COUNCIL. Ground water models: Scientific and regulatory applications. Washington, National Academy Press. 1990. 303 p

NATIONAL RESEARCH COUNCIL. **Ground water vulnerability assessment: Contamination potential under conditions of uncertainty**. Washington, National Academy Press. 1993. 204p.

OLIVEIRA, L. F. C. **Modelo para transporte de solutos no solo e no escoamento superficial**. 1999. 171p. Tese (Doutorado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Viçosa.

PEREIRA, A. R.; VILLA NOVA, N. A.; SEDIYAMA, G. C. **Evapo(transpi)ração**. Piracicaba: FEALQ, 1997. 183p.

PESSOA, M. C. P. Y.; LUCHIARI, A. J.; FERNANDES, E. N.; LIMA, M. A. **Principais modelos matemáticos e simuladores utilizados para análise de impactos das atividades agrícolas**. Jaguariúna: Embrapa, CNPMA. 1997. 83p.

PRATA, F. **Comportamento do glifosato no solo e deslocamento miscível da atrazina**. 2002. 148p. Tese (Doutorado em Agronomia) – Universidade de São Paulo

PRATA, F.; LAVORENTI, A. Retenção e mobilidade de defensivos agrícolas no solo. In: **Simpósio sobre dinâmica de defensivos agrícolas no solo**. ESALQ, Novembro, p. 56-69, 2002.

PRUSKI, F. F. **Desenvolvimento de metodologia para o dimensionamento de canais de terraços**. 1993. 96p. Tese (Doutorado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Viçosa.

RAMSAY, C. A., COGGER, C. G.; MacCONNELL, C. B. Protecting groundwater from pesticide contamination. <http://cru.cache.wsu.edu/CEPublications/eb1644/eb1644.html> Acesso em : 22/04/2002

REGITANO, J. B.; Propriedades físico-químicas dos defensivos e seu destino no ambiente. In: **Simpósio sobre dinâmica de defensivos agrícolas no solo**. ESALQ, Novembro, p. 40-50, 2002.

REGITANO, J. B.; ALLEONI, L. R. F.; VIDAL-TORRADO, P.; CASAGRANDE, J. C. TORNISIELO, V. L. Imazaquin sorption in highly weathered tropical soils. **Journal of Environmental Quality**, v.29, p. 894-900, 2000.

RICHARDSON, M. Pesticides-friend or foe. **Water Science. Technol.**v.8, n.37, p.19-25. 1988.

RITTER, W. F.; SCARBOROUGH, R. W.; CHIRNSIDE, A. E. M. Contamination of groundwater by triazines, metolachlor and alachlor. **Journal of Contaminant Hydrology**, v. 15, Issues 1-2, 1994, p. 73-92.

SHEARER, R.C., LETTEY, J., FARMER, W.J., KLUTE, A.. Lindane diffusion in soil. **Soil Science Society of America Proceedings**, v.37, 1973, p.189–193.

SMITH, M. C.; BOTTCHEER, A. B., CAMPBELL, M. Measurement of pesticide transport to shallow groundwater. **Transactions of the ASAE**. St. Joseph. v.33, n.5, p. 1573-1581, 1990.

VIEIRA; E. de O.; RAMOS, M. M.; CRUZ, I.; PRATES, H. T.; MARTINEZ, M. A. Movimentação de inseticidas de tratamento de sementes no solo sob efeito da irrigação. **Engenharia na Agricultura**. Viçosa. v.8, n.3, p.141-157, Jul/Set, 2000.

VIEIRA; E. de O.; PEREIRA, J. R. B; PRATES, H. T.; CRUZ, I.; VELOSO, F. **Avaliação da contaminação do Carbofuran nos solos do projeto Gorutuba**. Relatório final. Banco do Nordeste do Brasil, 2003, 30p.

WAGENET, R. J.; RAO, P. S. C. Basic concepts of modeling pesticide fate in the crop root zone. **Weed Science**, v. 33, (supplement 2), p. 25-32, 1985.

YEN, J-H.; HSIAO, F-L; WANG, Y-S. Assessment of insecticide Carbofuran's potential to contaminate groundwater through soils in the subtropics. **Ecotoxicology and Environmental Safety**, v.38, p.260-265, 1997.

CAPÍTULO 2

MODELGEM DO TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL DE ÁGUA E SOLUTOS NO SOLO

2.1. INTRODUÇÃO

A necessidade do aumento da produção e da produtividade dos sistemas agrícolas em todo o planeta fez surgir uma forte atividade industrial voltada à produção de compostos químicos para o controle de pragas e doenças. Estima-se que, só nos Estados Unidos, mais de 50.000 substâncias orgânicas foram registradas como pesticidas, embora deste, apenas 800 princípios ativos vem sendo utilizados em larga escala (NATIONAL RESEARCH COUNCIL - NRC, 1993).

Com o aumento do uso dessas substâncias, aumentaram não só a preocupação com a saúde dos seres vivos, mas também, com o destino dessas substâncias e os impactos no ambiente.

Os pesticidas possuem diversas formulações (líquidos, gases e sólidos) e são aplicados de diversas maneiras (aplicação aérea, pulverizações direta sobre as culturas, aplicação sobre o solo). Entretanto, uma vez introduzido no agroecossistema, o pesticida pode assumir diversas rotas. Especificamente no solo, o movimento da água pode arrastar passivamente o pesticida juntamente com o fluxo de massa. O movimento dos pesticidas no solo não se dá apenas de forma passiva com o movimento da água, podendo ser também translocado na fase líquida do solo em resposta a gradientes de concentração (difusão) e por meio da dispersão, proporcionada pela natureza errática do escoamento devido à geometria irregular da matriz do solo.

Ao mesmo tempo em que os pesticidas se movimentam no solo, ocorrem interações entre si e com a matriz do solo por meio dos fenômenos de adsorção e dessorção (interação sólido-soluto), reações químicas, transformações biológicas, solubilização, precipitação entre outras. Essas interações são influenciadas por uma série de fatores como acidez, temperatura, potencial de oxidação-redução e, até mesmo, composição e concentração da solução do solo. O destino final da movimentação desses compostos no solo pode ser o lençol freático.

Os modelos de simulação são uma tentativa de representar esses processos de movimentação utilizando equações matemáticas. A modelagem matemática tem se mostrado como valiosa ferramenta na avaliação do destino de compostos químicos no solo, permitindo antever o comportamento da sua lixiviação quando submetidos a diferentes cenários edafoclimáticos. Experimentos de campo, são laboriosos, caros e morosos, inviabilizando muitas vezes o estudo do comportamento e o monitoramento ambiental da maioria das substâncias utilizadas na agricultura.

A modelagem é um processo de desenvolvimento contínuo que se inicia com representações conceituais simples, ampliando gradativamente sua complexidade. Modelos determinísticos mecanísticos consistem na representação de processos com base em princípios físicos formulados por equações matemáticas. As soluções dessas equações requerem uma especificação completa das condições de contorno do sistema no espaço e no tempo e as condições iniciais para cada uma das variáveis de estado (DUST et al., 2000).

Diversos modelos, com os mais variados graus de complexidade tem sido desenvolvidos em outros países com a finalidade de simular o comportamento de pesticidas no solo. Dentre eles destacam-se o WAVE (Water and Agrochemicals in Soil Crop a Vadose Environmental), desenvolvido por VANCLOOSTER et al. (1994), que considera os processos convectivos-dispersivos no transporte de solutos; escoamento unidimensional de água em meio não saturado, fluxo de calor e um termo empírico de extração de água pelas plantas. CLEMENTE et al. (1993), desenvolveram o PESTFADE (Pesticide Fate and Dynamics in the Environment). Com o uso deste modelo pode-se simular o transporte de água e solutos, em condições de escoamento não permanente e unidimensional. Considera também, processos como transferência de calor, degradação química e volatilização. A Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (EPA) desenvolveu o PRZM

(Pesticide Root Zone Model) (CARSEL et al., 1993) que possibilita simular o destino de pesticidas no solo de forma unidimensional, com escala diária de tempo, considerando, também, o transporte de pesticida pelo escoamento superficial. Porém, esse modelo descreve vários processos empiricamente. Pode-se citar ainda, outros modelos bastante conhecidos no meio científico como o GLEAMS (LEONARD et al., 1987), LEACHP (Walker et al., 1995, citado por DUST et al., 2000), MACRO (Jarvis et al., 1994, citado por JARVIS et al., 2000) entre outros, sendo alguns mais funcionais (empíricos) e outros mais mecanísticos.

Apesar do número relativamente grande de modelos disponíveis, o desenvolvimento de modelos, adaptados às características edafo-climáticas inerentes ao Brasil, é, ainda, incipiente. Por isso este trabalho se propõe ao desenvolvimento de um modelo computacional que seja capaz de estimar a variação temporal e espacial da concentração de pesticidas no perfil do solo, fornecendo subsídios para tomada de decisões em estratégia de manejo e preservação do meio ambiente, nas condições brasileiras.

Neste contexto os objetivos desse trabalho foram:

- desenvolver um modelo computacional que permita simular o movimento de água e o transporte de compostos químicos no perfil do solo em condições de escoamento em solo saturado e não saturado, considerando os processos de absorção pelas raízes das culturas, adsorção e degradação no solo; e
- avaliar o modelo, para o inseticida Carbofuran, por meio de análises comparativas entre os resultados simulados e àqueles obtidos experimentalmente.

2.2. REVISÃO DE LITERATURA

2.2.1. Movimento da água no solo

O movimento da água no solo ocorrerá quando houver diferenças de potencial entre diferentes pontos de um sistema. O potencial total (H) é a quantidade de trabalho necessário para transferir, reversivelmente e isotermicamente, uma quantidade unitária de água de um estado padrão de referência, onde H é zero, para a situação onde ela tem o seu valor definido. Esse movimento se dá no sentido do decréscimo do potencial. Assim, toda vez que o potencial total for constante haverá equilíbrio e sempre que H for variável, haverá movimento.

Em 1856, Henry Darcy, investigando o fluxo de água em filtros verticais de areia na cidade de Dijon (França), foi o primeiro a estabelecer uma equação que possibilitou a quantificação do movimento da água em materiais porosos (BEAR, 1988; REICHARDT, 1996). Ele verificou que o fluxo de água é proporcional ao gradiente de potencial hidráulico no solo. Assim, chegou-se a seguinte equação:

$$q = -K_o \frac{H_1 - H_2}{L} = -K_o \frac{\Delta H}{L} = -K_o \nabla H \quad (2.2.1)$$

em que:

$$\nabla H = \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial z} \quad (2.2.2)$$

- q = fluxo de água no solo (LT^{-1})
 H = carga hidráulica (L);
 ∇H = gradiente hidráulico ($L L^{-1}$);
 K_0 = condutividade hidráulica do solo saturado (LT^{-1});
 L = espessura do solo analisado (L); e
 x,y,z = coordenadas de posição (L).

A lei de Darcy não é universalmente válida para todas as condições de escoamento líquido em meio poroso. Ela é aplicada somente para escoamento em regimes laminares e onde a interação água-solo não é afetada pela mudança da fluidez ou da permeabilidade com a mudança dos gradientes (HILLEL, 1980). O regime de escoamento laminar prevalece em solos de textura fina, com altos teores de silte e argila, com gradientes hidráulicos comumente baixos. Em solos arenosos, o gradiente hidráulico pode apresentar valores, que resultam em escoamento não-laminar e a lei de Darcy não poderia ser aplicada.

2.2.1.1. Condutividade hidráulica do solo

A condutividade hidráulica do solo é a propriedade do solo de se deixar atravessar por água.

A condutividade hidráulica é uma característica hidrodinâmica que expressa a capacidade do meio poroso em transmitir fluidos relacionando as características do meio e do fluido que circula nesse meio. Segundo BEAR (1979), condutividade hidráulica é o coeficiente de proporcionalidade (K) que aparece em várias formas da equação de Darcy (Equação 2.2.1).

Como características do solo relacionadas à condutividade hidráulica podem ser citadas a porosidade total, distribuição do tamanho dos poros, tortuosidade e a superfície específica das partículas. Estas características estão relacionadas com a geometria dos poros do solo. As características da solução são a massa específica e a viscosidade dinâmica que, por sua vez, são função da temperatura e da pressão no

meio. Os efeitos combinados da geometria dos poros e das características da solução do solo na condutividade hidráulica, podem ser expressos pela equação (HILLEL, 1980; REICHARDT, 1996 e PREVEDELHO, 1996):

$$K = K_{int} \frac{\rho g}{\mu} = K_{int} F_f \quad (2.2.3)$$

em que:

K_{int} = permeabilidade intrínseca do solo (L^2);

ρ = massa específica da água ($M L^{-3}$)

μ = viscosidade dinâmica do fluido ($M L^{-1} T^{-1}$)

g = aceleração da gravidade (LT^{-2})

F_f = fator de fluidez ($L^{-1}T^{-1}$)

A permeabilidade intrínseca de um solo (K_{int}) pode variar com o tempo, sob certas condições. Tal variação pode ser causada por uma carga externa podendo mudar a estrutura do solo (compactação) e por efeito da expansividade das argilas ou adensamento de camadas do solo provocadas pela eluviação de partículas finas conduzidas pelo movimento d'água (BEAR, 1979).

Mudanças na condutividade hidráulica podem ocorrer devido às alterações na estrutura, o que pode ocorrer com a entrada de água no solo contendo concentração ou composição diferente da solução do solo (HILLEL, 1980).

Partículas de argila carregadas eletrostaticamente atraem cátions com os quais formam a dupla camada difusa. Resumidamente, a dupla camada difusa consiste numa camada de eletrons em contato com a superfície das partículas sólidas na qual ocorre uma variação do potencial elétrico a partir da superfície da partícula. Esta variação é linear bem próximo dessa superfície, onde esse potencial é máximo (camada de STERN), até atingir um ponto onde o potencial começa a decrescer exponencialmente (modelo de Gouy-Chapman) (FONTES et al., 1996; HILLEL, 1980).

A dupla camada difusa está relacionada com os processos de dispersão e floculação. Quando a dupla camada é delgada ocorre a floculação; caso contrário ocorre a dispersão. Cátions de maiores raios iônicos apresentam menores raios hidratados e por isso podem substituir os cátions monovalentes, comprimindo a

dupla camada difusa, propiciando a ocorrência da floculação. Com isso, solos com alta concentração de sódio trocável (monovalentes) leva à dispersão da fração argila do solo tendendo a ser eluviada no perfil, provocando entupimento dos microporos e, com isso reduzindo a condutividade hidráulica.

2.2.1.3. A equação de Darcy-Buckingham

A equação de Darcy (Equação 2.2.1) foi desenvolvida para condições de solo saturado. Porém, a situação prática mais comum de escoamento de água em meios porosos ocorre em condição de solo não saturado. Nessa condição, os poros ocupados por ar reduzem a área efetiva ao escoamento resultando numa condutividade hidráulica em meios porosos não saturados sempre menor do que nos saturados (REICHARDT, 1996; HILLEL, 1980).

Buckingham, em 1907, modificou a equação de Darcy, para aplicá-lo ao movimento de água em solo não saturado, considerando que a condutividade hidráulica do solo não saturado é dependente do teor de água ou do potencial matricial (LIBARDI, 1995), isto é:

$$q = -K(\theta)\nabla H \text{ ou } q = -K(h)\nabla H \quad (2.2.4)$$

em que:

$K(\theta)$ = condutividade hidráulica em função do teor de água do solo (θ) (LT^{-1})

$K(h)$ = condutividade hidráulica em função potencial matricial (h) (LT^{-1})

Em 1928, Richards, citado por LIBARDI (1995), definiu o potencial total (H) para meios não saturados, como sendo igual à soma do componente matricial (h) com o componente gravitacional (z) $H = h + z$, e escreveu a equação do movimento da água, na direção vertical, em solos não saturados na forma:

$$q_z = -K(h)\left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1\right) \quad (2.2.5)$$

em que:

q_z = fluxo na direção vertical z (LT^{-1})

O movimento de água em solos não saturados, descrito pela Equação 2.2.5, é altamente dependente do teor de água. Segundo REICHARDT (1986), essa dependência faz com que o movimento da água varie em função do teor de água e da condutividade hidráulica, sendo assim, afetada pela histerese. A histerese é causada pela geometria irregular dos poros, incluindo formação de bolhas de ar na matriz do solo, características de expansão e contração do solo e diferença do ângulo de contato durante os processos de secagem e umedecimento (HILLEL, 1980; JURY et al., 1991; LIBARDI, 1995). A falta de modelos que incluam o fenômeno de histerese na curva de retenção de umidade do solo faz com que, na maioria dos casos, a equação de Darcy-Buckingham seja utilizada inadequadamente.

Pelo fato da equação de Darcy-Buckingham não descrever a variação do teor de água com tempo, a mesma deve ser combinada com a equação de conservação de massa, conforme descrito por Richards em 1928 e apresentada por inúmeros autores (REICHARDT, 1986; LEONARD et al., 1987; HILLEL, 1990; JURY e GARDNER, 1991; CARSEL et al., 1993; JARVIS et al., 1994; LIBARDI, 1995; SULEKHA et al., 1998; FRIEJER et al., 1998; VANCLOOSTER, et al. 2000), a qual assume a seguinte forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} \quad (2.2.6)$$

em que:

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

Considerando que o movimento de água ocorre apenas na vertical, a equação 2.2.6 torna-se:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial q_z}{\partial z} \quad (2.2.7)$$

Substituindo a equação 2.2.5 em 2.2.7:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right] \quad (2.2.8)$$

2.2.1.4. Capacidade Hídrica Específica

Sendo o potencial matricial da água no solo dependente do teor de água e esta por sua vez, função de z e t , isto é $h = h [\theta(z, t)]$, então: $\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial t} = E(h) \frac{\partial h}{\partial t}$.

Desta forma, a Equação 2.2.8 pode ser reescrita como:

$$E(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right] \quad (2.2.9)$$

ou

$$E(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \frac{\partial h}{\partial z} \right] + \frac{K(h)}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.2.10)$$

em que:

$$E(h) = \frac{\partial \theta}{\partial h} = \text{capacidade hídrica específica (L}^{-1}\text{)}.$$

Os maiores valores de $E(h)$ estão associados com a região da curva de retenção (Figura 2.2.1) onde prevalece as forças capilares e os poros perdem muita água com pequenas variações do potencial matricial. A capacidade hídrica específica (Figura 2.2.2) será zero na saturação, potencial matricial igual a zero, e permanece igual a zero até o início da desaturação quando ocorre o potencial matricial de entrada de ar. Ela aproximará de zero novamente na região da curva característica onde grandes variações de potencial resultam em pequenas variações de umidade (JURY e GARDNER, 1991).

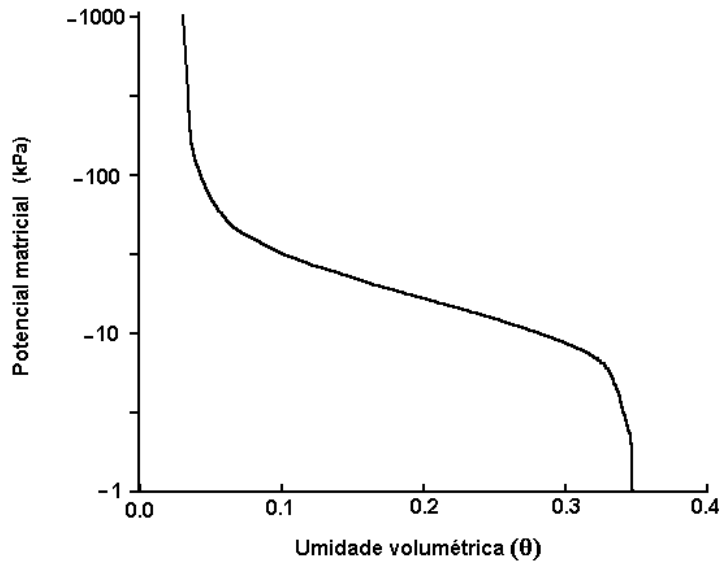


Figura 2.2.1 - Curva característica de água no solo

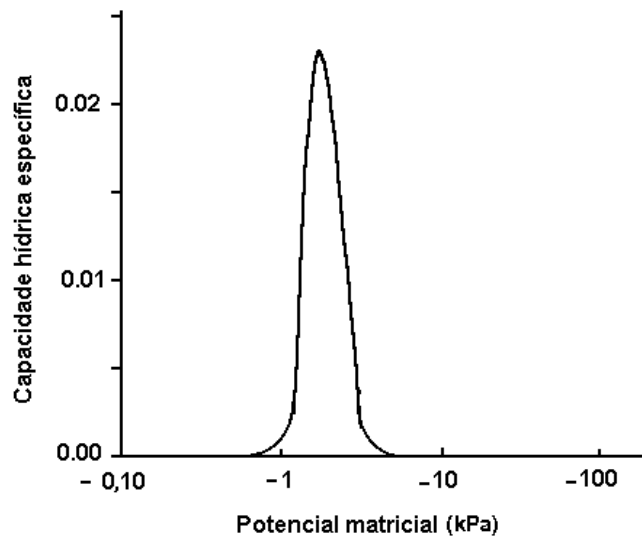


Figura 2.2.2 - Curva de retenção de água no solo e a correspondente curva da capacidade hídrica específica. (JURY e GARDNER, 1991)

Analisando o formato das curvas de retenção de água no solo, percebe-se que em solo saturado $E(h)$ tende a zero. Entretanto, quando se faz uso de métodos numéricos para resolver a Equação (2.2.9), em situações que o solo pode atingir a saturação, deve-se assumir, para regiões saturadas, valor de $E(h)$ diferente de zero. Valores $E(h)$ entre 10^{-7} e 10^{-3} , segundo ROGERS (1994), favorecem a convergência da equação de Richards quando se usa solução numérica. MARTINEZ (1989),

obteve bons resultados utilizando o valor de 10^{-5} em simulações com a técnica numérica de elementos finitos.

2.2.1.5. Determinação da condutividade hidráulica e da capacidade hídrica específica em solos não saturados

A condutividade hidráulica do solo pode ser determinada em campo, laboratório ou indiretamente por meio de modelos matemáticos.

As metodologias de determinação da condutividade hidráulica em condições de campo é relativamente simples. No entanto, a variabilidade espacial do solo e o alto tempo demandado dificultam o uso dessas metodologias. Por outro lado, o método de laboratório requer um meticuloso esquema de amostragem em campo e um rigoroso processamento das amostras em laboratório.

Devido à dificuldade de se determinar a condutividade hidráulica no campo ou laboratório, vários autores têm procurado estabelecer, modificar ou substabelecer modelos para estimar esse parâmetro a partir de outros parâmetros de solo mais facilmente mensuráveis como, por exemplo, a curva característica de retenção de água no solo e a condutividade hidráulica em condição de saturação (PREVEDELLO,1996).

As equações desenvolvidas por Burdine (1953), citado por TIMM (1995) e PREVEDELLO (1996), e de MUALEM (1976) desenvolvidas para possibilitar a predição da condutividade hidráulica relativa [$K_r = K(h)/K_o$ (ads)] em meios não saturados, permitiram a derivação de uma série de outras funções hidráulicas do solo:

$$K_r(Se) = Se^2 \left[\frac{\int_0^{Se} \frac{dSe}{h^2}}{\int_0^1 \frac{dSe}{h^2}} \right] \quad \text{BURDINE (1953)} \quad (2.2.11)$$

$$K_r(Se) = Se^{1/2} \left[\frac{\int_0^{Se} \frac{dSe}{h}}{\int_0^1 \frac{dSe}{h}} \right]^2 \quad \text{MUALEM (1976)} \quad (2.2.12)$$

em que a saturação efetiva, Se , é uma função adimensional do teor de água ou da tensão da água no solo.

A - Modelo de BROOKS e COREY (1964)

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

$$Se(h) = (h_b/h)^\lambda \quad \text{sendo } |h| > |h_b| \quad (2.2.13)$$

e

$$Se(h) = 1 \quad \text{para } |h| \leq |h_b| \quad (2.2.14)$$

em que:

$Se(h)$ = saturação efetiva, adimensional

h_b = potencial matricial de entrada de ar (L)

λ = Índice de distribuição de tamanho de poros, adimensional

Segundo os autores, o potencial matricial de entrada de ar (h_b) corresponde ao valor do potencial matricial em que, a partir do solo saturado, dá-se o início à entrada de ar nos poros maiores do solo.

Brutsaert (1967), citado por TIMM (1995), definiu a saturação efetiva pela seguinte expressão:

$$Se(h) = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2.2.15)$$

em que:

θ = teor de água em base volume ($L^3 L^{-3}$);

θ_r = teor de água residual em base volume ($L^3 L^{-3}$); e

θ_s = teor de água na saturação em base volume ($L^3 L^{-3}$).

Segundo ALEXANDER e SKAGGS (1986), Brooks e Corey obtiveram as equações para estimar a curva de retenção de água no solo, substituindo 2.2.13 e 2.2.14 em 2.2.15:

$$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r)(h_b/h)^\lambda \text{ sendo } |h| > |h_b| \quad (2.2.16)$$

e

$$\theta = \theta_s \quad \text{para } |h| \leq |h_b| \quad (2.2.17)$$

Substituindo as Equações (2.2.13) e (2.2.14) na Equação (2.2.11), obtém-se a equação proposta por Brooks e Corey para estimar a condutividade hidráulica:

$$K(h) = K_o \left(\frac{h_b}{h} \right)^{n_{bc}} \text{ sendo } |h| > |h_b| \quad (2.2.18)$$

e

$$K(h) = K_o \quad \text{para } |h| \leq |h_b| \quad (2.2.19)$$

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

A capacidade hídrica específica é obtida pela derivação das Equações (2.2.16) e (2.2.17) em relação ao potencial h:

$$E(h) = - \frac{\lambda(\theta_s - \theta_r) \left(\frac{h_b}{h} \right)^\lambda}{h} \quad (2.2.20)$$

B - Modelo de van GENUCHTEN (1980)

van GENUCHTEN (1980) propôs que $Se(h)$ pode ser expressa pela equação:

$$Se(h) = \left[\frac{1}{1 + (\alpha h)^n} \right]^m \text{ sendo } |h| \geq 0 \quad (2.2.21)$$

em que α e n são parâmetros relacionados às características do solo e $m = 1-1/n$.

Substituindo 2.2.21 na Equação 2.2.15 obtém-se a expressão que estima a curva de retenção de água no solo:

$$\theta = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left[1 + (\alpha h)^n \right]^{-m} \quad \text{sendo } |h| \geq 0 \quad (2.2.22)$$

Substituindo a Equação 2.2.21 na Equação 2.2.12, van GENUCHTEN (1980) obteve a equação para estimar a condutividade hidráulica em meio não saturado:

$$K(h) = K_o \frac{\left[(1 - (\alpha h)^{n-1}) (1 + (\alpha h)^n)^{-m} \right]^2}{(1 + (\alpha h)^n)^{m/2}} \quad \text{sendo } |h| \geq 0 \quad (2.2.23)$$

A equação para estimar a capacidade hídrica específica é obtida derivando-se a Equação 2.2.24, isto é:

$$E(h) = \frac{(1 - n)(\theta_s - \theta_r) \left[1 + (\alpha |h|)^n \right]^{(1/n)-2} (\alpha |h|)^n}{h} \quad (2.2.24)$$

Os parâmetros θ_r , h_b , n_{bc} , α e λ são obtidos a partir do ajuste, por regressão não linear, das Equações 2.2.16 e 2.2.22 aos valores experimentais da curva de retenção de água no solo.

2.2.2. Transporte de solutos no solo

2.2.2.1. Transporte convectivo de solutos no solo

O movimento convectivo, também denominado fluxo de massa de água no solo, ou fluxo de Buckingham-Darcy e até mesmo de movimento advectivo, refere-se ao movimento passivo do soluto com a água, isto é, o movimento do soluto se dá na mesma velocidade do escoamento linear médio. Este movimento tem como consequência um fluxo convectivo de solutos (J_c) proporcional à sua concentração, ou seja:

$$J_c = qC = -C \left[K(h) \frac{dH}{dz} \right] \quad (2.2.25)$$

em que:

- C = concentração do soluto (massa de soluto por unidade de volume de solução) ($M L^{-3}$);
- J_c = fluxo convectivo (massa de soluto que passa por unidade de área de solo e de tempo) ($M L^{-2} T^{-1}$);

Alguns autores preferem o termo “movimento advectivo” ao “movimento convectivo” pelo fato de convecção referir-se ao transporte em resposta a um gradiente de densidade.

O mecanismo convectivo não é suficiente para explicar o transporte de solutos no solo. Outros mecanismos devem ser considerados para descrever o transporte de solutos no solo.

2.2.2.2. Transporte de solutos por difusão

A difusão é um processo espontâneo e ocorre, geralmente, na fase líquida, resultante do movimento errático, chamado movimento Browniano, com repetidas colisões e deflexões de moléculas e íons. Esse movimento é devido ao bombardeamento dos solutos dispersos pelas moléculas do meio. Assim, os solutos adquirem, em condição de equilíbrio, energia cinética igual àquelas das moléculas do meio, numa dada temperatura. O resultado é uma tendência de igualar a distribuição espacial dos componentes difusíveis em qualquer fluido multicomponente. Quando os solutos não se distribuem uniformemente na solução do solo serão formados gradientes de concentração, forçando-os a se difundirem do ponto de maior para menor concentração (C). O fluxo decorrente deste gradiente pode ser expresso, de forma similar à primeira lei de Fick , por:

$$J_d = -D_o \frac{dC}{dz} \quad (2.2.26)$$

em que:

J_d = fluxo difusivo ($M L^{-2} T^{-1}$) e

D_o = coeficiente de difusão de soluto em água pura ($L^2.T^{-1}$).

O sinal negativo na equação acima indica que o fluxo possui sentido inverso ao do gradiente de concentração, com isso, o movimento se dará no sentido do decréscimo da concentração.

Na fase líquida do solo, o coeficiente de difusão é geralmente menor que o coeficiente de difusão em água pura (D_o) por várias razões (HILLEL, 1980). A fase líquida ocupa somente uma fração do volume do solo sendo que no estado de saturação esse volume é igual à porosidade do solo. Segundo REICHARDT (1996), os poros do solo são tão tortuosos que o comprimento do caminho percorrido pelo soluto na solução do solo é significativamente maior que uma aparente linha reta a ser percorrida pelo soluto em um meio contendo apenas água. No solo não saturado, como a umidade é decrescente, a fração do volume disponível na fase líquida diminui ainda mais, enquanto a tortuosidade aumenta. Se a umidade (θ) e a tortuosidade (ξ) forem os únicos fatores afetando o coeficiente de difusão no solo podemos escrever:

$$D_m = D_o \xi \quad (2.2.27)$$

em que:

$$D_m = \text{coeficiente de difusão molecular na solução do solo (L}^2\text{T}^{-1}\text{) e}$$

$$\xi = \text{fator de tortuosidade (ads).}$$

Segundo van GENUCHTEN e WIERENGA (1986), ' ξ ' pode variar de 0,3 a 0,7 para a maioria dos solos. Outros autores analisaram várias relações para se estimar o fator de tortuosidade, sendo a de Millington e Quirk (1961), citado por JURY et al. (1983), a mais aceita devido à simplicidade na obtenção desse fator:

$$\xi = \frac{\theta^{10/3}}{\theta_s^2} \quad (2.2.28)$$

Assim, o fluxo difusivo no solo pode estimado utilizando-se a equação:

$$J_d = -D_m \theta \frac{dC}{dz} \quad (2.2.29)$$

Os coeficientes de difusão molecular (D_m) estão geralmente em torno de 10^{-6} $\text{cm}^2 \text{ s}^{-1}$, entretanto, valores entre 10^{-5} e 10^{-7} $\text{cm}^2 \text{ s}^{-1}$ são aceitáveis em muitas aplicações práticas (GRISAK e PICKENS, 1981). A unidade ' θ ' foi introduzida na Equação 2.2.29 para se ter o fluxo difusivo em termos de massa de soluto que passa por unidade de área e de tempo, passando a coincidir dimensionalmente com o fluxo convectivo (Equação 2.2.25).

2.2.2.3. Transporte de solutos por dispersão

O movimento de qualquer solução não homogênea sujeito à dispersão mecânica produz um efeito análogo à difusão, que é a mistura entre as diferentes partes da solução que se movimentam.

A dispersão mecânica, que em algumas vezes predomina sobre a difusão, resulta da não uniformidade microscópica da velocidade da solução nos poros condutores do solo. Em escala microscópica, a velocidade varia em magnitude e direção através da seção transversal de um poro. A velocidade do fluido assumirá um valor zero na superfície do sólido e um valor máximo em algum ponto no interior do poro, comparável à distribuição parabólica da velocidade em um tubo capilar (BEAR, 1979 e ANDERSON, 1984). Desde que a água movimenta-se mais rapidamente quanto mais afastada das paredes dos poros condutores, atingindo um máximo nos seus centros geométricos, o mesmo acontecerá com o transporte dos solutos na solução. Ocorre, também, variação da trajetória e da velocidade média do escoamento, decorrente da variabilidade da geometria dos poros. Esse fenômeno que provoca o espalhamento do soluto na solução do solo devido à variação da velocidade em escala microscópica é, algumas vezes, denominado de difusão convectiva (BEAR, 1979). Dois elementos básicos neste tipo de mistura são, o regime de escoamento e a presença de um sistema poroso caracterizado por sua heterogeneidade numa escala macroscópica devido a variações na permeabilidade do domínio do escoamento.

A velocidade média de deslocamento da solução nos poros de um solo pode ser estimada a partir do fluxo da solução e da seção efetiva do escoamento definida por θ , isto é:

$$\bar{V} = \frac{q}{\theta} \quad (2.2.30)$$

em que, \bar{V} , velocidade média intrínseca é a distância, em linha reta, percorrida pela solução nos poros do solo, por unidade de tempo. Devido à tortuosidade geométrica dos poros do solo, isto é, das variações quanto à forma, direção e diâmetro dos mesmos, a velocidade real da solução no solo é altamente variável e, por isso chamada de velocidade média aparente (PREVEDELLO, 1996). É uma definição simplista, dada a variação de velocidade em várias ordens de magnitude dentro e entre os poros (HILLEL, 1980).

Devido à similaridade entre os processos difusivo e dispersivo, a equação que descreve o movimento dispersivo de solutos no solo é dada por:

$$J_h = -D_h \theta \frac{dC}{dz} \quad (2.2.31)$$

em que:

J_h = fluxo dispersivo ($M L^{-2} T^{-1}$) e

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

Ao contrário da difusão molecular, que ocorre tanto em condições estática quanto dinâmica da solução, a dispersão mecânica ocorre apenas em condições dinâmicas, isto é, quando há movimento da solução.

Vários são os fatores que influenciam o grau de dispersão dos solutos no solo. A velocidade média da solução, distribuição e tamanho dos poros, a umidade e o gradiente de concentração são alguns que podem ser citados mais facilmente. Quando a velocidade da solução for suficientemente alta, o efeito relativo do mecanismo da dispersão mecânica poderá exceder, em muito, o da difusão e vice-versa. (PREVEDELLO, 1996). Assim, o coeficiente da dispersão mecânica pode ser descrito como uma função da velocidade da solução no meio:

$$D_h = \delta \bar{V} \quad (2.2.40)$$

em que δ , é a dispersividade do meio.

Vários autores conduzindo trabalhos de transporte de solutos em meios porosos, obtiveram um parâmetro adimensional que permite avaliar a influência relativa da difusão e da dispersão mecânica na dispersão hidrodinâmica (van GENUCHTEN e WIERENGA,1986; SUN, 1996), denominado de número de Peclet (P_e)(adimensional):

$$P_e = \frac{\bar{V} z}{D_m} \quad (2.2.32)$$

em que:

P_e = número de Peclet (ads).

Quando P_e assume valores menores que 1 ($P_e < 1$), indica que a difusão é o processo dominante da dispersão hidrodinâmica e para valores de P_e maiores que 10 ($P_e > 10$) o processo dominante é a dispersão mecânica (ANDERSON, 1984; BEAR, 1988; MANOEL FILHO, 1997; SUN, 1996)

2.2.2.4. Coeficiente de dispersão hidrodinâmica

Devido à similaridade macroscópica entre a difusão molecular e a dispersão mecânica, os coeficientes D_m e D_h são considerados termos aditivos:

$$D = D_m + D_h \quad (2.2.33)$$

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

O coeficiente de dispersão hidrodinâmica (D), segundo supõem Frissel e Poelstra (1967), citados por PREVEDELLO (1996), está relacionado matematicamente com o coeficiente de difusão (D_o), por meio da equação:

$$D = D_o \xi + \varpi \delta \bar{V} \quad (2.2.34)$$

em que ω é o fator de empacotamento ou geometria das partículas (adimensional) e a dispersividade do solo ' δ ', definida anteriormente.

Segundo CHENG (1990), muitos hidrogeologistas usam a dispersividade para caracterizar o meio poroso e descrever o coeficiente de dispersão como sendo:

$$D = D_0 \xi + \delta \bar{V} \quad (2.2.35)$$

onde o fator de tortuosidade ' ξ ' assume valores, estimados empiricamente por FREEZE e CHERRY (1979), entre 0,5 e 0,01.

BEDIENT et al. (1999) e ANDERSON (1984) sugerem que o coeficiente de dispersão hidrodinâmica seja calculado com o fator de tortuosidade do meio ' ξ ' assumindo o valor unitário, obtendo-se assim:

$$D = D_0 + \delta \bar{V} \quad (2.2.36)$$

KIRDA et al. (1973) e BIGGAR e NIELSEN (1976), preferem utilizar a relação:

$$D = D_0 \xi + a \bar{V}^\Theta \quad (2.2.37)$$

em que ' a ' e ' Θ ' são parâmetros de correlação.

Tais suposições permitiram verificar que o coeficiente de dispersão hidrodinâmica ' D ' torna-se praticamente igual ao coeficiente de difusão de solutos no solo, quando a velocidade média da solução ' \bar{V} ' é menor que $0,002 \text{ m dia}^{-1}$.

2.2.2.5. Transporte convectivo e dispersivo de solutos no solo

Considerando-se os três mecanismos de transporte de solutos descritos anteriormente, isto é, o convectivo, difusão molecular e dispersão mecânica, e combinando as Equações 2.2.25, 2.2.29, 2.2.31 e 2.2.32, obtém-se:

$$J = J_C + (J_d + J_h) = qC - D\theta \frac{dC}{dz} \quad (2.2.38)$$

em que, 'J' é a massa total de um soluto transportado no solo por unidade de área e de tempo ($M.L^{-2} T^{-1}$).

Considerando um volume de controle limitado por dois planos paralelos de mesma área A, separados por uma distância vertical Δz (Figura 2.2.3), a quantidade de soluto que entra no volume de controle por um desses planos, por unidade de tempo, é AJ. A quantidade de soluto que sai do volume de controle através do plano oposto é $A[J + (\partial J/\partial z)\Delta z]$. A variação na quantidade de soluto dentro do volume de controle é $-A\left[\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial \rho_s S}{\partial t}\right]\Delta z$, onde $\partial(\theta C)/\partial t$ é a variação da concentração de soluto na solução, com o tempo, e $(\partial \rho_s S)/\partial t$ é a variação, com o tempo, na quantidade de soluto adsorvido nas partículas desse volume de controle .

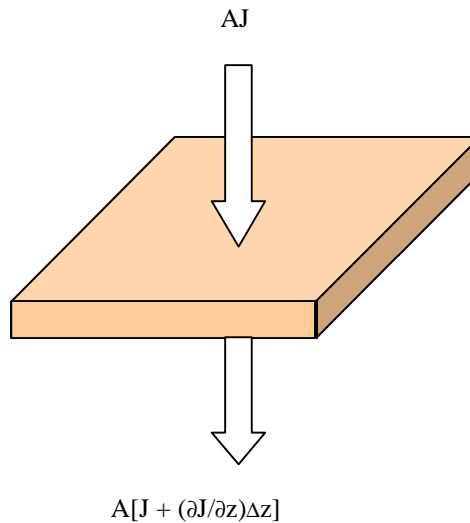


Figura 2.2.3 - Representação do elemento de volume de controle

Efetuada-se o balanço de massa no volume de controle, obtém-se:

$$-A\left[\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \frac{\partial \rho_s S}{\partial t}\right]\Delta z = A\left[J + \frac{\partial J}{\partial z}\Delta z\right] - AJ \quad (2.2.39)$$

a qual reduz-se a:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C + \rho_s S) = - \frac{\partial J}{\partial z} \quad (2.2.40)$$

em que S é a concentração adsorvida na fração sólida do solo (massa de soluto por unidade de massa de solo, $M M^{-1}$).

O sinal negativo é para indicar que a concentração no elemento diminui se a densidade de fluxo que sai for maior do que entra no elemento de solo, e vice-versa. (HILLEL, 1980 e PREVEDELLO, 1996).

Substituindo a Equação 2.2.38 na 2.2.40 e incluindo os termos de extração de solutos pelas plantas (Γ) e de decaimento molecular do soluto (Ψ), tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C + \rho_s S) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} - qC \right) - \Gamma - \Psi \quad (2.2.41)$$

A Equação 2.2.51 descreve o transporte de solutos no solo em condições unidimensional, isotérmico e isobárico e é válida para solutos sujeitos à adsorção pelos sólidos e á reações químicas e/ou biológicas. Os dois termos entre parênteses do lado esquerdo referem-se às mudanças, no tempo, da concentração dos solutos na fração líquida e sólida do solo, respectivamente (van GENUCHTEN e WIERENGA, 1986).

2.2.3 - Isotermas de sorção

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.

As isotermas podem ter uma variedade de formas dependendo das características do adsorvato e da superfície de adsorção e, algumas vezes, de outros constituintes da solução. Na Figura 2.2.4 estão apresentados algumas formas de isotermas (BASKARAN e KENNEDY, 1999).

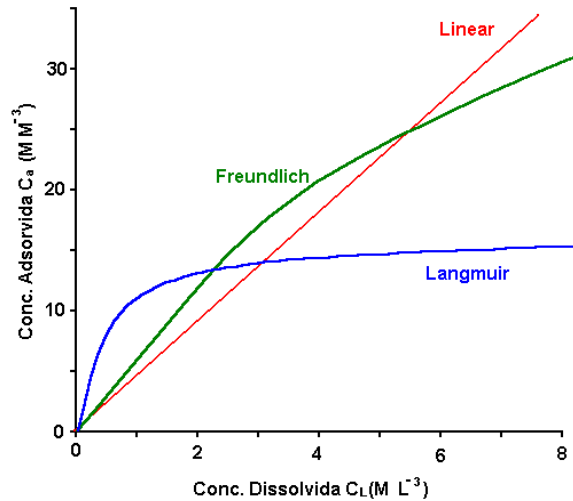


Figura 2.2.4 - Formas de isotermas de adsorção (JURY e GARDNER, 1991).

Um grande número de isotermas utilizadas para estimar a retenção de solutos no solo são relatados por diversos autores (GREEN e KARICKOFF, 1990; JURY e GARDNER, 1991; HINZ et al., 1994; BASKARAN e KENNEDY, 1999; BEDIANT et al., 1999). As duas isotermas mais utilizadas em modelos de transporte de solutos no solo são as isotermas de Langmuir (Equação 2.2.42) e Freundlich (Equação 2.2.43):

$$S = \frac{\kappa S_{\max} C}{1 + \kappa C} \quad (2.2.42)$$

$$S = K_d C^N \quad (2.2.43)$$

em que:

κ = parâmetro empírico (ads);

S_{\max} = adsorção máxima do soluto no solo ($M M^{-3}$);

N = constante empírica (ads); e

K_d = coeficiente de partição ($L^3 M^{-1}$).

Com base na Figura 2.2.4, em baixas concentrações de soluto na solução de equilíbrio, a equação linear se ajusta muito bem a todo tipo de dados assim como a linear não pode dar bons ajustes para altas concentrações em solução.

Na isoterma de Langmuir, em que S aumenta linearmente com C , a baixas concentrações, e se aproxima de um valor constante (S_{\max}) em altas concentrações, é a mais apropriada para solos com baixa capacidade de troca de cátions, os quais possuem uma capacidade finita de adsorção (JURY e GARDNER, 1991).

A equação de Freundlich, em que a constante N é usualmente menor que 1, tem descrito satisfatoriamente a sorção de pesticidas no solo. Quando $N = 1$, a equação de Freundlich passa a ser uma equação linear, também conhecida como isoterma linear:

$$S = K_d C \quad (2.2.44)$$

em que K_d é o coeficiente de partição ($L^3 M^{-1}$).

A isoterma linear é uma simplificação desejada para modelar processos ambientais complexos, permitindo soluções matemáticas mais simples.

De acordo com GREEN e KARICKOFF (1990), o uso da isoterma linear em muitos modelos tem apresentado erros aceitáveis.

Segundo van GENUCHTEN e WIERENGA (1986), considerando a isoterma de sorção linear e o escoamento permanente em um perfil homogêneo de solo saturado, a Equação 2.2.41 reduz-se a:

$$FR \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} - qC \right) - \Gamma - \Psi \quad (2.2.45)$$

em que FR (Fator de retardamento, ads) é definido por:

$$FR = \theta + \rho_s K_d \quad (2.2.46)$$

Segundo os mesmos autores, se FR for menor que 1 apenas uma fração da fase líquida participa do processo de transporte, podendo representar a presença de regiões líquidas imóveis como, por exemplo, dentro de agregados muito densos contendo poros de diâmetro muito pequeno, os quais não contribuem para o transporte convectivo.

2.2.4. Absorção de água e solutos pelas plantas

O processo de absorção de água e solutos pelas raízes é extremamente complexo devido à variação no comportamento e desenvolvimento radicular em resposta a muitas variáveis relacionadas à planta e ao solo (TINKER e NYE, 2000).

Segundo REICHARDT (1996), a descrição exata da absorção de água pelas plantas por meio de teoria bem fundamentada é muito difícil, se não impossível, devido às complicações inerentes das relações espaço-tempo envolvidas no processo. Segundo esse mesmo autor, esse processo depende de fatores do solo (condutividade hidráulica, difusividade, relações entre umidade e potencial); da planta (densidade de raízes, profundidade, taxa de crescimento de raízes, fisiologia da raiz e área foliar) e da atmosfera (déficit de saturação, vento e radiação disponível).

Vários modelos de absorção de água pelas plantas estão apresentados na literatura, compondo sub-rotinas de modelos de crescimento de planta, balanço de água no solo ou de lixiviação de pesticidas. Porém, cada um trata o sistema solo-planta-atmosfera de uma forma muito peculiar, com os mais variados graus de complexidade (CARDON e LETEY, 1992; BEHRENDT ET AL., 1995; COELHO e OR, 1996; TINKER e NYE, 2000).

Semelhantemente ao processo de absorção de água pelas plantas, a absorção de compostos orgânicos ou inorgânicos no solo é dependente de vários fatores, dentre os quais pode-se enumerar as propriedades do solo, do pesticida, da planta e da atmosfera.

A absorção de pesticidas pelas plantas tem sido ignorada em muitos modelos devido principalmente, à falta de informações quantitativas para que se possa incorporar esse processo eficientemente nos modelos (WAGENET e RAO, 1990).

A maioria dos pesquisadores tem assumido que qualquer imprecisão na simulação do destino de pesticidas na rizosfera é resultado de uma série de processos físico-químico-biológicos, no qual se inclui a extração pelas plantas (TINKER e NYE, 2000). Porém, é importante que esse tipo de processo seja considerado nos modelos.

Segundo TINKER e NYE (2000), o comportamento de compostos orgânicos no solo é pouco estudado. Porém, os princípios que governam tal comportamento são considerados os mesmos para as aproximações utilizadas para inorgânicos. Com isso,

alguns modelos de extração de solutos no solo não fazem distinção entre o tipo de material a ser absorvido pela planta.

BEESE e WIERENGA (1980) propuseram um modelo em que a extração de soluto pelas plantas pode ser descrito da seguinte forma:

$$\Gamma(z, t, h) = \frac{D_{\text{rad}}(z, t) K(h)}{RD_m} T_p F(z, t, h) C(z, t) \quad (2.2.47)$$

$$\int_0^{RD_m} D_{\text{rad}}(z, t) K(h) dz$$

Γ = extração de soluto do solo pelas plantas ($M L^{-3} T^{-1}$)

RD_m = profundidade máxima do sistema radicular (L);

D_{rad} = densidade do sistema radicular ($M L^{-3}$);

T_p = transpiração potencial da cultura ($L T^{-1}$),

F = razão de absorção de água no solo (adimensional)

A razão de absorção de água no solo (F) é definida como sendo a razão entre a transpiração real (T_r) e a potencial (T_p) da cultura. O valor de $F(z,t,h)$ depende do potencial matricial da água no solo (Figura 2.2.5) (BEESE e WIERENGA, 1980).

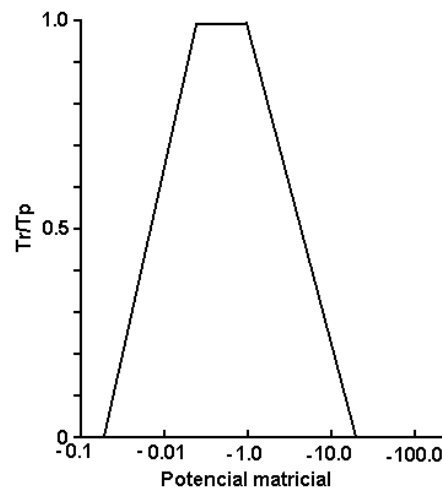


Figura 2.2.5 - Relação entre a razão de absorção de água e o potencial matricial da água no solo

2.2.5. Degradação

A degradação ou transformação refere-se às mudanças na estrutura química do pesticida, sendo que os subprodutos resultantes desta transformação passam a exibir reatividade, toxicidade e propriedades distintas da molécula original. Dentre os diversos tipos de transformações, sejam bióticas ou abióticas, as mediadas por organismos vivos são tidas como as mais importantes (BEDIENT et al. 1999; REGITANO et al. 2000).

Na maioria dos modelos assume-se que os processos microbiológicos de degradação dos pesticidas ocorrem, predominantemente na região do sistema radicular. Abaixo dessa essa região, atingindo ou não a zona saturada, a degradação química passa a ser mais importante.

Da mesma forma que a sorção de pesticidas é representada simplesmente por equações de isothermas linear ou Freundlich, a degradação pode ser simplesmente representada por cinéticas de primeira ordem.

Duas equações de degradação mais utilizadas são (BEDIENT et al., 1999):

$$\Psi = \eta C^\pi \quad (2.2.48)$$

e

$$\Psi = V_{MAX} \left[\frac{C}{\vartheta + C} \right] \quad (2.2.49)$$

em que:

Ψ = degradação do pesticida no solo ($M L^{-3} T^{-1}$);

η = coeficiente de degradação (T^{-1});

π = ordem da reação (ads);

V_{MAX} = taxa de degradação máxima ($M L^{-3} T^{-1}$); e

ϑ = parâmetro empírico ($M L^{-3}$).

O coeficiente de degradação, ' η ', pode ser calculado da seguinte forma:

$$\eta = \frac{\text{Ln}2}{t_{1/2}} \quad (2.2.50)$$

em que:

$t_{1/2}$ = meia-vida do pesticida no solo (T^{-1})

Ln = Logaritmo neperiano

O valor de meia vida de um pesticida ' $t_{1/2}$ ' expressa o tempo em que 50 % de sua quantidade aplicada no solo encontra-se transformada de alguma forma.

RAO e DAVIDSON (1980) compilaram valores de coeficiente de degradação de primeira ordem para alguns pesticidas de várias fontes na literatura. Valores de η e $t_{1/2}$ medidos no campo e no laboratório, para alguns compostos, apresentaram coeficiente de variação < 100%, valor considerado baixo, levando-se em conta a ampla diversidade nas condições de solo e ambiente no qual os estudos foram realizados.

A dependência de η em relação fatores tais como umidade do solo, temperatura salinidade e características do substrato, tem sido estudada e utilizada para desenvolver vários modelos de degradação. Um procedimento muito utilizado na maioria dos estudos ou em modelos é estimar o valor de η em laboratório e ajustá-lo às condições de campo (WAGENET e RAO, 1990).

2.3. MATERIAL E MÉTODOS

Este trabalho foi conduzido em duas etapas sendo que a primeira constou do desenvolvimento físico-matemático de modelo computacional, denominado HIDROSOLO, capaz de prever o movimento de água e solutos no solo com a presença de culturas e a segunda etapa referiu-se às análises comparativas entre os resultados simulados usando o modelo e aqueles obtidos experimentalmente.

2.3.1 Desenvolvimento do modelo

O modelo matemático desenvolvido neste trabalho consistiu na resolução, por meio da técnica numérica de diferenças finitas, de equações diferenciais parciais de transporte de água e solutos no solo considerando a extração de água e solutos pelas plantas e a degradação do pesticida no solo.

2.3.1.1 Concepção física do modelo

O modelo é unidimensional vertical para todos os processos considerados. A região física modelada compreende a região entre a superfície do solo e uma profundidade finita L , sendo a heterogeneidade do perfil considerada na forma de camadas (Figura 2.3.1).

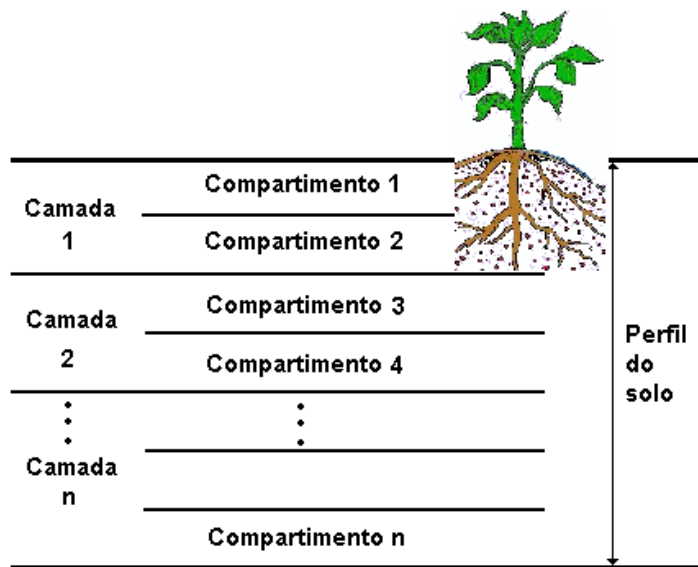


Figura 2.3.1 – Representação esquemática da região de estudo

2.3.1.2. Equação do movimento de água no solo

Na análise do movimento de água em meio poroso isotérmico, isobárico, unidimensional, com coordenada vertical positiva para baixo, e em condições não saturadas, foi utilizada a equação de Richards que, incluindo o termo fonte/sumidouro para representar a extração de água pelas plantas, assumiu a forma:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] + R \quad (2.3.1)$$

em que:

R = termo fonte ou sumidouro de água no solo (T^{-1}).

Escrevendo o primeiro termo de 2.3.1 em função de (h):

$$E(h) \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(h) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right] + R \quad (2.3.2)$$

As condições iniciais e de contorno utilizadas no desenvolvimento do modelo para a região de estudo apresentada na Figura 2.3.1, foram:

$$h(z,0) = h(z)_{\text{inicial}} \text{ para } t = 0 \text{ e } 0 \leq z \leq L \quad (2.3.3a)$$

$$q = r \text{ se } T_{ie} \geq r \text{ para } z = 0 \text{ e } 0 \leq t \leq t_p \quad (2.3.3b)$$

$$h = 0 \text{ se } T_{ie} < r \text{ para } z = 0 \text{ e } 0 \leq t \leq t_p \quad (2.3.3c)$$

$$q = -K(h) \left[\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right] \text{ para } z = L \text{ e } t > 0 \quad (2.3.3d)$$

$$h(z,t) = h_n \text{ para } t > 0 \text{ e } z = 0 \text{ ou } z = L \quad (2.3.3e)$$

$$q = E_v \text{ se } E_v < E_{v_{\text{solo}}} \text{ para } z = 0 \text{ e } t > t_p \quad (2.3.3f)$$

$$h = h_{\text{min}} \text{ se } E_v > E_{v_{\text{solo}}} \text{ para } z = 0 \text{ e } t > t_p \quad (2.3.3g)$$

A Equação 2.3.3a descreve a condição inicial em termos de potencial matricial. A Equação 2.3.3b descreve a condição de contorno na superfície quando o fluxo de água é igual a intensidade da chuva ou irrigação (r), durante o tempo em que ocorre o evento (t_p), desde que a intensidade de precipitação não seja maior que a taxa de infiltração estável do solo (T_{ie}). A Equação 2.3.3c descreve a condição de contorno na superfície em termos de potencial matricial, quando (r) for maior que (T_{ie}). A Equação 2.3.3d descreve a condição de contorno quando não se conhece o potencial na extremidade inferior ($z = L$), utilizando, assim, a condição do tipo fluxo ou Neuman. A equação 2.3.3e, descreve a condição de contorno para os limites superior e inferior quando a condição do tipo potencial constante ou Dirichlet é utilizada. A condição de contorno na superfície, quando a demanda evaporativa do ar (E_v) é menor do que a capacidade de evaporação do solo ($E_{v_{\text{solo}}}$), é descrita pela Equação 2.3.3f, e, quando a demanda evaporativa do ar é maior que a capacidade de evaporação do solo, o fluxo evaporativo da superfície é limitado por um potencial mínimo (h_{min}), descrito pela Equação 2.3.3g.

A resolução da Equação 2.3.2 foi obtida discretizando o perfil do solo em compartimentos de espessura Δz identificados pelos nós ‘i’ (ponto do domínio modelado que possuem funções definidas), e o tempo em intervalos Δt , identificados pelo subscritos ‘j’ (Figura 2.3.2).

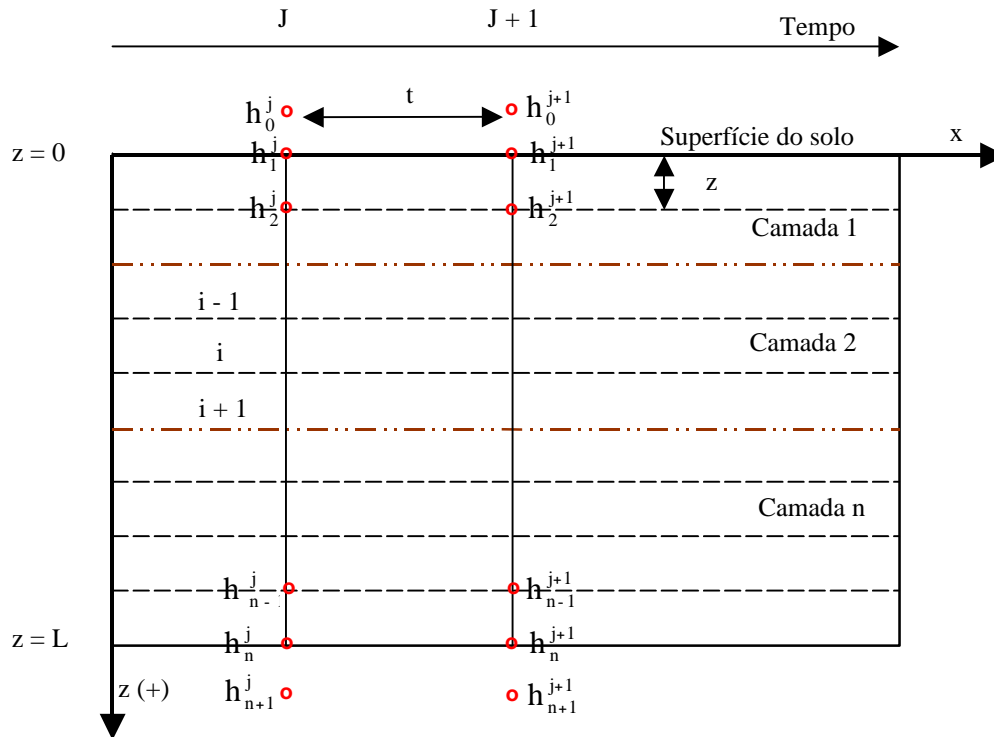


Figura 2.3.2 - Discretização do perfil do solo em compartimentos utilizada na resolução da equação de Richards pelo método de diferenças finitas

A solução analítica da equação de Richards é difícil devido a sua forma parabólica combinada e a forte não-linearidade decorrente das relações dos parâmetros hidráulicos do solo, tais como, umidade, condutividade hidráulica e capacidade hídrica específica, com o potencial matricial (van DAM e FEDDES, 2000). Para a resolução numérica da Equação 2.3.2 utilizou-se a técnica numérica denominada diferenças finitas.

A solução é obtida em duas etapas. A primeira etapa consistiu da obtenção da primeira estimativa do potencial matricial empregando o esquema de discretização implícita da Equação 2.3.2, com linearização explícita dos parâmetros $K(h)$ e $E(h)$ (VANCLOOTER et al., 1994). A segunda etapa consistiu de um refinamento da solução utilizando o processo iterativo de Newton-Raphson, com esquema de discretização implícita da Equação 2.3.1, segundo CORRÊA (2001).

Considerando que os compartimentos z terão os mesmos valores, isto é, terão as mesmas dimensões (Figura 2.3.1), a Equação 2.3.2 passa a ter a seguinte forma:

$$E_i^j \frac{h_i^{j+1} - h_i^j}{\Delta t} = \frac{K_{i+1/2}^j \left[\frac{h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right] - K_{i-1/2}^j \left[\frac{h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right]}{\Delta z} + R_i^j \quad (2.3.4)$$

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

$$K_{i-1/2}^j = \frac{K_{i-1}^j + K_i^j}{2} \quad (2.3.5)$$

$$K_{i+1/2}^j = \frac{K_i^j + K_{i+1}^j}{2} \quad (2.3.6)$$

Resolvendo a Equação 2.3.4 para os valores de potencial matricial no tempo “j + 1”, encontra-se o seguinte sistema de equações:

$$a_i h_{i-1}^{j+1} + b_i h_i^{j+1} + c_i h_{i+1}^{j+1} = d_i \quad (2.3.7)$$

tendo seus coeficientes:

$$a_i = -\frac{\Delta t}{\Delta z^2} K_{i-1/2}^j \quad (2.3.8)$$

$$b_i = E_i^j + \frac{\Delta t}{\Delta z^2} (K_{i+1/2}^j + K_{i-1/2}^j) \quad (2.3.9)$$

$$c_i = -\frac{\Delta t}{\Delta z^2} K_{i+1/2}^j \quad (2.3.10)$$

$$d_i = E_i^j h_i^j - \frac{\Delta t}{\Delta z} K_{i+1/2}^j + \frac{\Delta t}{\Delta z} K_{i-1/2}^j + \Delta t R_i^j \quad (2.3.11)$$

A Equação 2.3.7, no formato apresentado, é válida para os nós centrais, excluindo-se o primeiro e o último nós, cujas equações estão condicionadas às condições de contorno.

A aplicação da Equação 2.3.7 em cada nó resulta numa matriz tridiagonal definida pelos seus coeficientes. A dimensão da matriz depende da discretização da região de estudo tendo “n” equações e “n” incógnitas.

$$\begin{pmatrix}
 b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{n-2} & b_{n-2} & c_{n-2} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_n & b_n
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 h_1 \\
 h_2 \\
 h_3 \\
 \cdot \\
 \cdot \\
 \cdot \\
 h_{n-2} \\
 h_{n-1} \\
 h_n
 \end{pmatrix}^{j+1}
 =
 \begin{pmatrix}
 d_1 \\
 d_2 \\
 d_3 \\
 \cdot \\
 \cdot \\
 \cdot \\
 d_{n-2} \\
 d_{n-1} \\
 d_n
 \end{pmatrix}
 \quad (2.3.12)$$

O sistema de equações gerado (Equação 2.3.12) é resolvido utilizando o algoritmo de Thomas (HAMMING, 1988). Quando as condições de contorno forem do tipo potencial, as equações para os nós dos contornos serão eliminadas reduzindo as dimensões da matriz.

a) Condição de contorno tipo potencial constante (Dirichlet)

Nesta condição de contorno, os valores de potenciais matriciais do primeiro e último nó são conhecidos em qualquer tempo. Conseqüentemente, o sistema de Equações 2.3.7 é válido para a região situada entre os nós $i = 2$ e $i = n-1$ e as equações para estes nós tornam-se, respectivamente:

$$b_2 h_2^{j+1} + c_2 h_3^{j+1} = \varepsilon_2 \quad (2.3.13)$$

e

$$a_{n-1} h_{n-2}^{j+1} + b_{n-1} h_{n-1}^{j+1} = \varepsilon_{n-1} \quad (2.3.14)$$

em que:

$$\varepsilon_2 = d_2 - a_2 h_1^{j+1} \quad (2.3.15)$$

e

$$\varepsilon_{n-1} = d_{n-1} - c_{n-1}h_n^{j+1} \quad (2.3.16)$$

b) Condição de contorno tipo fluxo (Neuman)

Neste tipo de condição o valor do fluxo é conhecido no contorno da região e os valores dos potenciais matriciais são desconhecidos. Desta forma, para a obtenção das equações para os nós nos contornos utiliza-se de um ponto fictício situado fora da região de estudo (Figura 2.3.2). Aplicando a Equação 2.3.4 para o primeiro nó, tem-se:

$$E_1^j \frac{h_1^{j+1} - h_1^j}{\Delta t} = \frac{K_{1+1/2}^j \left[\frac{h_2^{j+1} - h_1^{j+1}}{\Delta Z} - 1 \right] - K_{1-1/2}^j \left[\frac{h_1^{j+1} - h_0^{j+1}}{\Delta Z} - 1 \right]}{\Delta Z} + R_1^j \quad (2.3.17)$$

Reescrevendo a equação 2.3.17, obtém-se:

$$a_1 h_0^{j+1} + b_1 h_1^{j+1} + c_1 h_2^{j+1} = d_1 \quad (2.3.18)$$

O fluxo através da superfície do solo (q_s), isto é, no nó 1, pode ser representado por:

$$q_s^{j+1} = -K_{1-1/2}^j \left(\frac{h_1^{j+1} - h_0^{j+1}}{\Delta Z} \right) + K_{1-1/2}^j \quad (2.3.19)$$

Explicitando h_0 na Equação (2.3.19) tem-se:

$$h_0^{j+1} = h_1^{j+1} + \frac{\Delta Z q_s^{j+1}}{K_{1-1/2}^j} - \Delta Z \quad (2.3.20)$$

Substituindo a Equação 2.3.20 em 2.3.18 e resolvendo para o potencial no tempo $J + 1$, obtém-se:

$$(a_1 + b_1)h_1^{j+1} + c_1h_2^{j+1} = e_1 \quad (2.3.21)$$

em que:

$$a_1 + b_1 = E_1^j + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} K_{1+1/2}^j \quad (2.3.22)$$

$$c_1 = -\frac{\Delta t}{\Delta Z^2} K_{1+1/2}^j \quad (2.3.23)$$

$$e_1 = E_1^j h_1^j - \frac{\Delta t}{\Delta Z} K_{1+1/2}^j + \frac{\Delta t}{\Delta Z} q_s^{j+1} + \Delta t R_1^j \quad (2.3.24)$$

Considerando o potencial para o nó fictício fora da região de estudo $i = n + 1$ como sendo h_b , a Equação discretizada 2.3.4 , para este nó, passa a ser representada por:

$$E_n^j \frac{h_n^{j+1} - h_n^j}{\Delta t} = \frac{K_{n+1/2}^j \left[\frac{h_b^{j+1} - h_n^{j+1}}{\Delta Z} - 1 \right] - K_{n-1/2}^j \left[\frac{h_n^{j+1} - h_{n-1}^{j+1}}{\Delta Z} - 1 \right]}{\Delta Z} + R_n^j \quad (2.3.25)$$

e o sistema de equações por:

$$a_n h_{n-1}^{j+1} + b_n h_n^{j+1} + c_n h_b^{j+1} = d_n \quad (2.3.26)$$

Adotando-se o mesmo procedimento matemático usado para o nó $i = 1$, o fluxo na extremidade inferior é representado por:

$$q_b^{j+1} = -K_{n+1/2}^j \left(\frac{h_b^{j+1} - h_n^{j+1}}{\Delta Z} \right) + K_{n+1/2}^j \quad (2.3.27)$$

em que:

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

Portanto, a equação para o nó $i = n$, torna-se igual a:

$$a_n h_{n-1}^{j+1} + (b_n + c_n) h_n^{j+1} = f_n \quad (2.3.28)$$

em que:

$$a_n = -\frac{\Delta t}{\Delta Z^2} K_{n-1/2}^j \quad (2.3.29)$$

$$b_n + c_n = E_n^j + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} K_{n-1/2}^j \quad (2.3.30)$$

$$f_n = E_n^j h_n^j + \frac{\Delta t}{\Delta Z} K_{n-1/2}^j - \frac{\Delta t}{\Delta Z} q_b^{j+1} + \Delta t R_n^j \quad (2.3.31)$$

Quando o valor de “ q_b ” não for estabelecido, o mesmo será calculado considerando-se as condições de escoamento no último compartimento no tempo j , isto é:

$$q_b = -\frac{K_n^j + K_{n-1}^j}{2} \left[\frac{h_n^j - h_{n-1}^j}{\Delta Z} - 1 \right] \quad (2.3.32)$$

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

O vetor resultante h_i^{j+1} obtido na primeira estimativa da solução da Equação 2.3.2 não representa o balanço de massa exato dentro de cada compartimento do solo. Por não ser um procedimento iterativo, isto é, o cálculo de h_i^{j+1} é efetuado considerando-se as características hidrodinâmicas referentes ao potencial no tempo j , erros são produzidos, principalmente quando houver uma grande variação na umidade ou quando esta estiver próximo à saturação (VANCLOOSTER et al., 1994). Sendo assim, a solução do sistema de equações requer a utilização de um processo iterativo, em que a primeira estimativa do potencial matricial determina os valores de $K(h)$ e $E(h)$. Esses valores de $K(h)$ e $E(h)$ são utilizados para a obtenção da segunda estimativa de “ h ”, cujos os valores são comparados com aos valores da primeira estimativa.

Para esse processo, denominado de refinamento da solução, empregou-se a técnica de Newton-Raphson, utilizada por CORRÊA (2001), e a Equação 2.3.1, é

resolvida iterativamente até atingir a convergência desejada. Essa convergência é atingida quando o erro absoluto entre os valores de $[\mathbf{h}_i^{j+1}]^{\tau+1}$ e $[\mathbf{h}_i^{j+1}]^\tau$ for menor que a precisão (σ) adotada, ou seja:

$$\text{abs}([\mathbf{h}_i^{j+1}]^{\tau+1} - [\mathbf{h}_i^{j+1}]^\tau) \leq \sigma \quad (2.3.33)$$

sendo que τ é o número da iteração.

O processo de refinamento utilizando o método de Newton-Raphson consiste na obtenção de uma função auxiliar “F” por meio da discretização da Equação 2.3.1, sendo essa função igual a:

$$F_i = \frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} - \frac{K_{i+1/2}^{j+1} \left[\frac{h_{i+1}^{j+1} - h_i^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right] - K_{i-1/2}^{j+1} \left[\frac{h_i^{j+1} - h_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} - 1 \right]}{\Delta z} - R_i^j \quad (2.3.34)$$

A melhor solução é obtida pelo método de Newton-Raphson quando:

$$F_i^\tau + \left[\frac{\partial F_i^\tau}{\partial h_{i-1}^{j+1}} + \frac{\partial F_i^\tau}{\partial h_i^{j+1}} + \frac{\partial F_i^\tau}{\partial h_{i+1}^{j+1}} \right] ([\mathbf{h}_i^{j+1}]^{\tau+1} - [\mathbf{h}_i^{j+1}]^\tau) = 0 \quad (2.3.35)$$

As derivadas parciais da função auxiliar são obtidas por meio da equação (2.3.34), resultando em:

$$\frac{\partial F_i}{\partial h_i^{j+1}} = \frac{1}{\Delta t} \frac{\partial \theta_i^{j+1}}{\partial h_i^{j+1}} + \frac{K_{i+1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} + \frac{K_{i-1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} = \frac{E_i^{j+1}}{\Delta t} + \frac{K_{i+1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} + \frac{K_{i-1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} \quad (2.3.36)$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial h_{i-1}^{j+1}} = - \frac{K_{i-1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} \quad (2.3.37)$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial h_{i+1}^{j+1}} = - \frac{K_{i+1/2}^{j+1}}{\Delta z^2} \quad (2.3.38)$$

Substituindo as Equações 2.3.34, 2.3.36, 2.3.37 e 2.3.38 na equação 2.3.35, tem-se:

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\theta_i^{j+1} - \theta_i^j}{\Delta t} \right)^\tau - \\
& \frac{(\mathbf{K}_{i+1/2}^{j+1})^\tau \left[\frac{(h_{i+1}^{j+1})^{\tau+1} - (h_i^{j+1})^{\tau+1}}{\Delta Z} - 1 \right] - (\mathbf{K}_{i-1/2}^{j+1})^\tau \left[\frac{(h_i^{j+1})^{\tau+1} - (h_{i-1}^{j+1})^{\tau+1}}{\Delta Z} - 1 \right]}{\Delta Z} \\
& - \mathbf{R}_i^j + \left(\frac{\mathbf{E}_i^{j+1}}{\Delta t} \right)^\tau \left((h_i^{j+1})^{\tau+1} - (h_i^{j+1})^\tau \right) = 0 \quad (2.3.39)
\end{aligned}$$

Rearranjando esta Equação 2.3.39, encontra-se o sistema de equações para a resolução do problema:

$$A_i (h_{i-1}^{j+1})^{\tau+1} + B_i (h_i^{j+1})^{\tau+1} + C_i (h_{i+1}^{j+1})^{\tau+1} = D_i \quad (2.3.40)$$

em que:

$$A_i = - \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} (\mathbf{K}_{i-1/2}^{j+1})^\tau \quad (2.3.41)$$

$$B_i = (\mathbf{E}_i^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} (\mathbf{K}_{i+1/2}^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} (\mathbf{K}_{i-1/2}^{j+1})^\tau \quad (2.3.42)$$

$$C_i = - \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} (\mathbf{K}_{i+1/2}^{j+1})^\tau \quad (2.3.43)$$

$$D_i = (\mathbf{E}_i^{j+1} h_i^{j+1})^\tau - \left((\theta_i^{j+1})^\tau - \theta_i^j \right) - \frac{\Delta t}{\Delta Z} (\mathbf{K}_{i+1/2}^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta Z} (\mathbf{K}_{i-1/2}^{j+1})^\tau + \mathbf{R}_i^j \Delta t \quad (2.3.44)$$

Assim como o sistema de equações 2.3.7 o sistema de equações para o refinamento, é aplicado apenas aos nós centrais, $2 \leq i < n-1$. Para os nós nos limites da região de estudo, deve-se incorporar ao sistema de equações as condições de contorno do problema.

a) Condição de contorno tipo Dirichlet

Neste caso, os valores de potenciais matriciais do primeiro e último nó são conhecidos em qualquer tempo. Conseqüentemente, o sistema de Equações 2.3.40 está delimitado pelos nós $i = 2$ e $i = n-1$ e as equações para estes nós tornam-se,

respectivamente:

$$B_2(h_2^{j+1})^{\tau+1} + B_2(h_3^{j+1})^{\tau+1} = \varepsilon_i \quad (2.3.45)$$

e

$$A_{n-1}(h_{n-2}^{j+1})^{\tau+1} + B_{n-1}(h_{n-1}^{j+1})^{\tau+1} = \varepsilon_{n-1} \quad (2.3.46)$$

em que:

$$\varepsilon_2 = d_2 - a_2(h_1^{j+1})^{\tau+1} \quad (2.3.47)$$

e

$$\varepsilon_{n-1} = D_{n-1} - C_{n-1}(h_n^{j+1})^{\tau+1} \quad (2.3.48)$$

b) Condição de Contorno tipo Neumann

Adotando-se o mesmo procedimento utilizado na primeira estimativa do potencial matricial, o sistema de equações 2.3.40, para os nós extremos, torna-se igual a:

$$(A_1 + B_1)(h_1^{j+1})^{\tau+1} + C_1(h_2^{j+1})^{\tau+1} = e_1 \quad (2.3.49)$$

Quando se considera $i = 2$ tem-se:

$$A_1 + B_1 = (E_1^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} (K_{1+1/2}^{j+1})^\tau \quad (2.3.50)$$

$$C_1 = -\frac{\Delta t}{\Delta Z^2} (K_{1+1/2}^{j+1})^\tau \quad (2.3.51)$$

$$e_1 = (E_1^{j+1} h_1^{j+1})^\tau - ((\theta_1^{j+1})^\tau - \theta_1^j) - \frac{\Delta t}{\Delta Z} (K_{1+1/2}^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta Z} q_s + \Delta t R_1^j \quad (2.3.52)$$

Para o nó situado no limite inferior, tem-se:

$$A_n(h_{n-1}^{j+1})^{\tau+1} + (B_n + C_n)(h_n^{j+1})^{\tau+1} = f_n \quad (2.3.53)$$

sendo que:

$$A_n = -\frac{\Delta t}{\Delta Z^2} (K_{n-1/2}^{j+1})^\tau \quad (2.3.54)$$

$$B_n + C_n = (E_1^{j+1})^\tau + \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} (K_{n-1/2}^{j+1})^\tau \quad (2.3.55)$$

$$f_n = (E_n^{j+1} h_n^{j+1})^\tau - ((\theta_n^{j+1})^\tau - \theta_n^j) + \frac{\Delta t}{\Delta Z} (K_{n-1/2}^{j+1})^\tau - \frac{\Delta t}{\Delta Z} q_b + \Delta t R_n^j \quad (2.3.56)$$

2.3.1.3. Modelos para simulação da curva de retenção de umidade no solo

A solução da Equação (2.3.2) requer o conhecimento da condutividade hidráulica do solo não saturado $K(h)$ e da capacidade hídrica específica $E(h)$, que, por sua vez, são dependentes do potencial matricial de água no solo.

Na solução da Equação 2.3.2, os valores de $K(h)$ e de $E(h)$ são estimados tanto pelo modelo de BROOKS e COREY (1964), Equações de 2.2.24 a 2.2.27, quanto pelo de van GENUCHTEN (1980), Equações 2.2.30 a 2.2.31, por serem os mais empregados na modelagem do movimento de água no solo.

2.3.1.4. Extração de água pelas plantas

A quantidade de água extraída pelas plantas, ou a variação em que ocorre esse processo, não depende de maneira exclusiva do conteúdo ou do potencial de água no solo; depende também da capacidade das raízes de absorverem água do solo, bem como da capacidade desse solo em transmitir água para as raízes de forma a satisfazer as exigências transpiratórias. Esse processo depende de propriedades da planta (densidade radicular, profundidade, velocidade de crescimento radicular), de propriedades do solo (textura, condutividade hidráulica, transmissividade), da diferença de potencial entre o solo e as raízes e das condições meteorológicas que determinam a taxa de transpiração. Para composição do modelo computacional foram aproveitadas equações desenvolvidas por SELIM e ISKANDAR (1981) e VANCLOOSTER et al. 1994, que retratam bem, em escala macroscópica, essa interação entre planta, solo e clima, apresentada pela Equação 2.3.57:

$$R = \frac{D_{\text{rad}}(z, t) K(h)}{RD_m} T_p(t) F(z, t, h) \quad (2.3.57)$$

$$\int_0^{RD_m} D_{\text{rad}}(z, t) K(h) dz$$

em que:

- D_{rad} = densidade do sistema radicular ($L L^{-3}$);
 RD_m = profundidade máxima do sistema radicular (L);
 T_p = taxa de transpiração potencial da cultura ($L T^{-1}$); e

2.3.1.4.1. Estimativa da transpiração

A taxa de transpiração potencial foi estimada subtraindo a evaporação da água na superfície do solo da evapotranspiração potencial da cultura (ETp). O valor de Ev foi obtido por FARIA e MADRAMOOTTO (1996) da seguinte forma:

$$Ev = e^{-0,6 IAF} ETp \quad (2.3.58)$$

$$T_p = ETp - Ev \quad (2.3.59)$$

em que:

- Ev = evaporação potencial ($L T^{-1}$);
IAF = índice de área foliar ($L^2 L^{-2}$); e
ETp = evapotranspiração potencial da cultura ($L T^{-1}$).

A evapotranspiração potencial da cultura foi calculada por meio da evapotranspiração de referência (ETo) e do coeficiente da cultura (Kc) (JESSEN et al. 1990):

$$ETp = Kc ETo \quad (2.3.60)$$

A evapotranspiração de referência foi calculada por meio do método de Penman-Monteith (PEREIRA et al., 1997).

O índice de área foliar foi calculado utilizando o modelo proposto por GOUDRIAAN e van LAAR (1994):

$$\frac{dIAF_k}{dt} = P_{Folha} AFE C_m - K_e IAF_{k-1} \quad (2.3.61)$$

em que:

P_{Folha} = partição de matéria seca para as folhas (ads);

AFE = área foliar específica ($L^2 M$);

C_m = taxa de crescimento absoluto da cultura ($M L^{-2} T^{-1}$); e

K_e = coeficiente de extinção da cultura (ads).

O índice ($k - 1$) do lado direito da Equação 2.3.61 refere-se ao valor do IAF do dia anterior. Com isso, deve-se ter um valor inicial de IAF para o início dos cálculos.

A partição de matéria seca para as folhas está relacionada ao estágio de desenvolvimento da cultura, o qual foi definido usando-se o conceito de graus-dia, segundo o qual a temperatura é fator que influencia os estádios de desenvolvimento da planta (JENSEN et al., 1990). Os estádios de desenvolvimento foram definidos pelas relações:

- da sementeira até o florescimento:

$$ED = \frac{GD}{GDF} \quad (2.3.62)$$

- do florescimento até maturação:

$$ED = \frac{GD - GDF}{GDM - GDF} + 1 \quad (2.3.63)$$

em que:

ED = estágio de desenvolvimento da cultura (ads);

GD = graus-dias acumulados ($^{\circ}C$);

GDF = graus-dias acumulados para atingir o florescimento ($^{\circ}C$); e

GDM = graus-dias acumulados para atingir a maturação ($^{\circ}C$).

O desenvolvimento da cultura será, nesse caso, expresso por meio de uma escala que varia de 0 a 2, em que 0 é a emergência, 1 a antese ou início da floração e 2 a maturidade fisiológica da planta. Assim, P_{Folha} assumirá diferentes valores nos diferentes estádios da cultura.

A utilização de ED no modelo faz com que as variáveis de estado, referentes à cultura, não sejam função do tempo e sim de condições ambientais.

O modelo utiliza, ainda, interações que descrevem as pressuposições fisiológicas da planta. Inicia-se pela captura e utilização da radiação pela cultura, levando ao cálculo da fotossíntese bruta do dossel, que se transforma em carboidrato. Esse carboidrato, por sua vez, após os gastos com respiração de manutenção e crescimento, transforma-se em matéria seca disponível para ser particionada entre os diversos órgãos da planta.

A fotossíntese bruta do dossel foi calculada de acordo com a equação de FRANCE e THORNLEY (1984):

$$F_{\text{Bruta}} = F_{\text{max}} \frac{C_{\text{Dia}}}{K_e} \ln \left(\frac{\delta + \gamma + (2\delta \gamma + \gamma^2)^{1/2}}{\delta e^{(-K_e \cdot \text{IAF})} + \gamma + (2\delta \gamma e^{(-K_e \cdot \text{IAF})} + \gamma^2)^{1/2}} \right) \quad (2.3.64)$$

em que:

$$\delta = E_f K_e \frac{R_a}{C_{\text{dia}}} \quad (2.3.65)$$

$$\gamma = (1 - m) F_{\text{max}} \quad (2.3.66)$$

e

F_{Bruta} = fotossíntese bruta do dossel da cultura ($M L^{-2} T^{-1}$);

F_{max} = fotossíntese máxima realizada ($M L^{-2} T^{-1}$);

C_{Dia} = duração do dia (T);

E_f = eficiência fotoquímica ($M L^{-2} T^{-1}$);

R_a = radiação fotossinteticamente ativa ($M L^{-2} T^{-1}$);

m = coeficiente de transmissividade de luz (ads).

O cálculo da transformação da fotossíntese bruta em matéria seca pode ser efetuado, utilizando a equação de FRANCE e THORNLEY (1984):

$$MS = \left(F_{\text{Bruta}} \frac{30}{44} \right) Ec - (0,25F_{\text{Bruta}} + 0,015MS_{p-1}) \quad (2.3.67)$$

em que:

MS = matéria seca total produzida pela planta ($M L^{-2} T^{-1}$);

30/44 = parâmetro de conversão de carboidratos em matéria seca (ads);

Ec = eficiência de crescimento (ads).

O segundo termo do lado direito da Equação (2.3.67) refere-se aos gastos com a respiração de manutenção e de crescimento. O índice (p-1) refere-se ao valor do MS do dia anterior.

2.3.1.4.2. Densidade do sistema radicular

Como parte integrante da planta, o crescimento do sistema radicular está ligado às condições de crescimento de toda a planta. Com isso, um modelo que descreve o crescimento radicular tem que, necessariamente, estar relacionado com as condições que afetem o crescimento da planta (ADIKU et al., 1996). Porém, no desenvolvimento desse modelo, foram utilizadas equações empíricas de amplo uso em modelos que descrevem o processo de maneira mais simples (GERWITZ e PAGE, 1974; SELIM e ISKANDAR, 1981; VANCLOOSTER et al., 1994; VOGEL et al., 1996 e CORRÊA, 2001) para o cálculo da densidade do sistema radicular :

$$D_{\text{rad}}(z, t) = a z_r(t) + b \quad (2.3.64)$$

$$D_{\text{rad}}(z, t) = a e^{-bz_r(t)} \quad (2.3.65)$$

em que:

a, b = constantes empíricas (ads);

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

O estudo de crescimento radicular e sua relação com as condições do solo têm avançado mais lentamente do que o estudo de outras partes da planta. Este lento progresso tem sido parcialmente atribuído às dificuldades de se obter dados observados do crescimento radicular das culturas. Com isso, muitos pesquisadores, quando introduzem o processo de crescimento radicular em seus modelos, o fazem de forma mais simplista.

Para o cálculo do valor de $Z_r(t)$, foi utilizada a equação de FERERES et al. (1981), que descreve o comportamento do crescimento radicular de forma linear (Equação 2.3.66) e a equação de BORGES e GRIMES (1986), que descreve o crescimento radicular com um comportamento sigmoidal (Equação 2.3.67):

$$z_r(t) = RD_0 + (RD_m - RD_0) \frac{t_p}{t_m} \quad (2.3.66)$$

$$z_r(t) = RD_m \left[0,5 + 0,5 \operatorname{Sen} \left(3,03 \frac{t_p}{t_m} - 1,47 \right) \right] \quad (2.3.67)$$

em que:

RD_0 = profundidade de plantio (L);

RD_m = profundidade máxima das raízes (L);

t_p = tempo após o plantio (T);

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

2.3.1.4.3. Fator empírico da equação de extração de água

O fator $F(z,t,h)$, que representa a razão entre a taxa de absorção real e o potencial de água no solo, foi calculado utilizando o modelo proposto por BERNARDO (1996), segundo o qual, a evapotranspiração real da cultura ocorre em condições normais de cultivo, podendo ser calculada da seguinte forma:

$$ET_r = K_s ET_p \quad (2.3.68)$$

sendo:

$$K_s = \frac{\text{Ln}(L_a + 1)}{\text{Ln}(\text{CTA} + 1)} \quad (2.3.69)$$

em que:

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

K_s = coeficiente de umidade (adimensional);

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

CTA = capacidade total de armazenamento de água no solo (L).

2.3.1.5. Transporte de solutos no solo

A partir da Equação 2.2.41 e considerando a isoterma de adsorção linear e um termo para a degradação do produto, o transporte de solutos no perfil do solo, pode ser representados pela seguinte equação diferencial:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \rho_g k_d \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial qC}{\partial z} - \Gamma - \Psi \quad (2.3.70)$$

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

= termo de degradação ($M L^{-3} T^{-1}$).

Expandido o lado direito da Equação 2.3.70, tem-se:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \rho_g k_d \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial (\theta D)}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z} + (\theta D) \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - q \frac{\partial C}{\partial z} - C \frac{\partial q}{\partial z} - \Gamma - \Psi \quad (2.3.71)$$

As condições iniciais e de contorno para a Equação 2.3.71, utilizadas para a região de estudo apresentada na Figura (2.3.1), são dadas por:

$$C(z,0) = C(z)_{\text{inicial}} \text{ para } t = 0 \text{ e } 0 \leq z \leq L \quad (2.3.72a)$$

$$qC - \theta D \frac{\partial C}{\partial z} = qC_0 \text{ para } z = 0 \text{ e } 0 \leq t \leq t_p \quad (2.3.72b)$$

$$\frac{\partial C}{\partial z}(L, t) = 0 \text{ para } z = L \text{ e } t > 0 \quad (2.3.72c)$$

$$C(z, t) = C_0 \text{ para } z = 0 \text{ ou } z = L \text{ e } t > 0 \quad (2.3.72d)$$

A Equação 2.3.72a descreve a condição inicial em termos de concentração do soluto ao longo de todo o perfil do solo. A Equação 2.3.72b descreve a condição de contorno na superfície quando o fluxo de soluto nessa superfície é igual ao fluxo de massa devido à concentração do soluto na solução (C_0) que infiltra no solo durante a ocorrência de chuva ou irrigação que ocorre no tempo t_p .

Segundo van GENUCHTEN e PARKER (1984) e PARLANGE et al. (1992), a condição de contorno 2.3.72c somente é válida para a situação em que na saída da região física estudada, a concentração é macroscopicamente contínua, não ocorrendo qualquer ruptura do escoamento da solução provocada pelos macroporos do solo durante todo o período de simulação.

I - Solução numérica da equação do transporte de solutos no solo

Escrevendo a Equação 2.3.71 na forma de diferenças finitas e aplicando o esquema de discretização implícita pelo método de Crank-Nicolson (GERALD e WHEATLEY, 1984), conforme empregado por CORRÊA (2001), tem-se para cada termo:

$$\begin{aligned} \text{Termo: } & \frac{\partial \theta}{\partial t} C + \rho_g k_d \frac{\partial C}{\partial t} \\ & = \frac{\theta_i^{j+1} C_i^{j+1} - \theta_i^j C_i^j}{\Delta t} + \rho_{g_i} k_{d_i} \frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} \\ & = \left(\frac{\theta_i^{j+1} + \rho_{g_i} k_{d_i}}{\Delta t} \right) C_i^{j+1} - \left(\frac{\theta_i^j + \rho_{g_i} k_{d_i}}{\Delta t} \right) C_i^j \end{aligned} \quad (2.3.73)$$

$$\begin{aligned} \text{Termo: } & \frac{\partial (\theta D)}{\partial z} \frac{\partial C}{\partial z} \\ & = \frac{1}{2} \left(\frac{\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} - \theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} + \frac{\theta_i^j D_i^j - \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j}{\Delta z} \right) \times \frac{1}{2} \left(\frac{C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1}}{\Delta z} + \frac{C_i^j - C_{i-1}^j}{\Delta z} \right) \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} - \theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1} + \theta_i^j D_i^j - \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j) (C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1} + C_i^j - C_{i-1}^j) \quad (2.3.74)$$

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

$$= \frac{\chi}{4\Delta Z^2} C_i^{j+1} - \frac{\chi}{4\Delta Z^2} C_{i-1}^{j+1} + \frac{\chi}{4\Delta Z^2} (C_i^j - C_{i-1}^j) \quad (2.3.75)$$

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

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j}{2} \right) \left(\frac{C_{i+1}^{j+1} - 2C_i^{j+1} + C_{i-1}^{j+1}}{2\Delta Z^2} + \frac{C_{i+1}^j - 2C_i^j + C_{i-1}^j}{2\Delta Z^2} \right) \\ &= \frac{1}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) (C_{i+1}^{j+1} - 2C_i^{j+1} + C_{i-1}^{j+1}) \\ &\quad + \frac{1}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) (C_{i+1}^j - 2C_i^j + C_{i-1}^j) = \\ &= \frac{1}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) C_{i+1}^{j+1} - \frac{2}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) C_i^{j+1} \\ &\quad + \frac{1}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) C_{i-1}^{j+1} + \frac{1}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) (C_{i+1}^j - 2C_i^j + C_{i-1}^j) \quad (2.3.76) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} &= - \left(\frac{C_{i-1}^{j+1} + C_{i-1}^j}{2} \right) \left(\frac{q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1}}{2\Delta Z} + \frac{q_i^j - q_{i-1}^j}{2\Delta Z} \right) \\ &= - \frac{1}{4\Delta Z} (C_{i-1}^{j+1} + C_{i-1}^j) (q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j) \\ &= - \frac{1}{4\Delta Z} (q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j) C_{i-1}^{j+1} - \frac{1}{4\Delta Z} (q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j) C_{i-1}^j \quad (2.3.77) \end{aligned}$$

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

$$= - \left(\frac{q_{i-1}^{j+1} + q_{i-1}^j}{2} \right) \left(\frac{C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1}}{2\Delta Z} + \frac{C_i^j - C_{i-1}^j}{2\Delta Z} \right) - \Gamma_i^j - \Psi_i^j$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{4\Delta Z} (q_{i-1}^{j+1} + q_{i-1}^j) (C_i^{j+1} - C_{i-1}^{j+1} + C_i^j - C_{i-1}^j) - \Gamma_i^j - \Psi_i^j \\
&= \\
&-\frac{1}{4\Delta Z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j) C_i^{j+1} + \frac{1}{4\Delta Z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j) C_{i-1}^{j+1} - \frac{1}{4\Delta Z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j) (C_i^j - C_{i-1}^j) \\
&- \Gamma_i^j - \Psi_i^j \tag{2.3.78}
\end{aligned}$$

reorganizando os termos da equação, obtém-se:

$$p_i C_{i-1}^{j+1} + w_i C_i^{j+1} + r_i C_{i+1}^{j+1} = s_i \tag{2.3.79}$$

em que:

$$\begin{aligned}
p_i &= -\frac{\Delta t}{4\Delta Z^2} (\theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1} + \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j) + \frac{\Delta t}{4\Delta Z} (q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j) \\
&- \frac{\Delta t}{4\Delta Z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j) \tag{2.3.80}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
w_i &= \theta_i^{j+1} + \rho_{g_i} k_{d_i} + \frac{\Delta t}{4\Delta Z^2} (\theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1} + \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j) + \frac{\Delta t}{4\Delta Z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j) \\
&+ \frac{\Delta t}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) \tag{2.3.81}
\end{aligned}$$

$$r_i = -\frac{\Delta t}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) \tag{2.3.82}$$

$$\begin{aligned}
s_i &= (\theta_i^j + \rho_{g_i} k_{d_i}) C_i^j + \frac{\Delta t}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} - \theta_{i-1}^{j+1} D_{i-1}^{j+1} + \theta_i^j D_i^j - \theta_{i-1}^j D_{i-1}^j) (C_i^j - C_{i-1}^j) \\
&- \frac{\Delta t}{4\Delta Z} (q_i^{j+1} - q_{i-1}^{j+1} + q_i^j - q_{i-1}^j) C_{i-1}^j - \frac{\Delta t}{4\Delta Z} (q_{i-1}^{j+1} - q_{i-1}^j) (C_i^j - C_{i-1}^j) - \Gamma_i^j \Delta t - \Psi_i^j \Delta \\
&+ \frac{\Delta t}{4\Delta Z^2} (\theta_i^{j+1} D_i^{j+1} + \theta_i^j D_i^j) (C_{i+1}^j - 2C_i^j + C_{i-1}^j) \tag{2.3.83}
\end{aligned}$$

a) Condição de contorno tipo Dirichlet

Para esse tipo de condição de contorno, a concentração C_1 e C_n são conhecidas em qualquer tempo, e o sistema de Equações 2.3.79 inicia-se a partir do nó $i = 2$ até $i = n-1$. Nesses nós, o sistema de equações torna-se:

$$w_2 C_2^{j+1} + r_2 C_3^{j+1} = \Phi_2 \quad (2.3.84)$$

e

$$p_{n-1} C_{n-2}^{j+1} + w_{n-1} C_{n-1}^{j+1} = \Phi_{n-1} \quad (2.3.85)$$

em que:

$$\Phi_2 = s_2 - p_2 C_1^{j+1} \quad (2.3.86)$$

e

$$\Phi_{n-1} = s_{n-1} - r_{n-1} C_n^{j+1} \quad (2.3.87)$$

a) Condição de Contorno tipo Cauchy

Diversos trabalhos relacionados com o estudo de deslocamento miscível no solo têm apresentado a condição de contorno do terceiro tipo, também denominada condição de Robim, mista ou Cauchy, como a mais apropriada para definir a entrada de solutos no solo, isto é, nos nós do limite superior da região de estudo (van GENUCHTEN e PARKER, 1984; van GENUCHTEN e WIERENGA, 1986). Para encontrar a solução numérica da Equação 2.3.71 submetidas às Equações 2.3.72b e 2.3.72c, que representam a condição de contorno tipo fluxo para o movimento de solutos no solo no primeiro e último nós, respectivamente, utilizou-se o procedimento em que o sistema de Equações 2.3.79, para o primeiro nó, é representado por:

$$p_1 C_a^{j+1} + w_1 C_1^{j+1} + r_1 C_2^{j+1} = s_1 \quad (2.3.88)$$

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

Após discretizada, a Equação 2.3.72b pode ser representada por:

$$q_i^{j+1}C_i^{j+1} - \theta_i^{j+1}D_i^{j+1} \left(\frac{C_i^{j+1} - C_a^{j+1}}{\Delta Z} \right) = q_i^{j+1}C_0 \quad (2.3.89)$$

Rearranjando a equação acima para explicitar a concentração fictícia, obtém-se:

$$C_a^{j+1} = \frac{q_i^{j+1}\Delta Z}{\theta_i^{j+1}D_i^{j+1}}C_0 + \left(1 - \frac{q_i^{j+1}\Delta Z}{\theta_i^{j+1}D_i^{j+1}} \right)C_i^{j+1} \quad (2.3.90)$$

Substituindo a Equação 2.3.90 na Equação 2.3.88, e denominando

$\alpha = \frac{q_i^{j+1}\Delta Z}{\theta_i^{j+1}D_i^{j+1}}$, obtém-se:

$$t_1C_1^{j+1} + r_1C_2^{j+1} = u_1 \quad (2.3.91)$$

em que:

$$t_1 = p_1 - p_1\alpha + w_1 \quad (2.3.92)$$

$$u_1 = s_1 - p_1\alpha C_0 \quad (2.3.93)$$

A solução numérica considerando a ausência de aplicação de solutos no solo, juntamente com a água, é facilmente obtida fazendo-se C_0 igual à zero nas equações acima mencionadas.

Utilizando-se um procedimento semelhante para o último nó, mas considerando a Equação 2.3.72c ao invés da equação 2.3.72b, o sistema de equações 2.3.79 fica representado por:

$$p_n C_{n-1}^{j+1} + (w_n + r_n)C_n^{j+1} = s_n \quad (2.3.94)$$

2.3.1.6. Extração de soluto pelas plantas

Semelhantemente à extração de água pelo sistema radicular das culturas, a extração de solutos foi feita por meio da equação de BEESE e WIERENGA (1980),

considerando a evapotranspiração real da cultura, a densidade de raízes, a condutividade hidráulica e a concentração do soluto em solução:

$$\Gamma = \frac{D_{\text{rad}}(z, t) K(h)}{RD_m} T_p(t) F(z, t, h) C(z, t) \quad (2.3.95)$$

$$\int_0 D_{\text{rad}}(z, t) K(h) dz$$

Assim como ocorre para a equação de movimento de água, a Equação 2.3.95 só é aplicada aos nós centrais, excluindo-se o primeiro e o último nó.

2.3.1.7. Degradação do pesticida em solução no solo

A degradação do pesticida no solo é representada pela cinética de primeira ordem ($\pi = 1$) (JURY et al. 1983; WAGENET e RAO, 1990; PETIT e CABRIDENC, 1995; FREIJER et al. 1998; BA A AO LU et al., 2002):

$$\Psi = \eta C^\pi = \frac{\text{Ln}2}{t_{1/2}} C(z, t) \quad (2.3.96)$$

2.3.1.8. Fluxograma do aplicativo

A Figura 2.3.3 apresenta o fluxograma do aplicativo com as principais rotinas de cálculos e o processo iterativo para a resolução das equações de movimento de água e transporte de solutos.

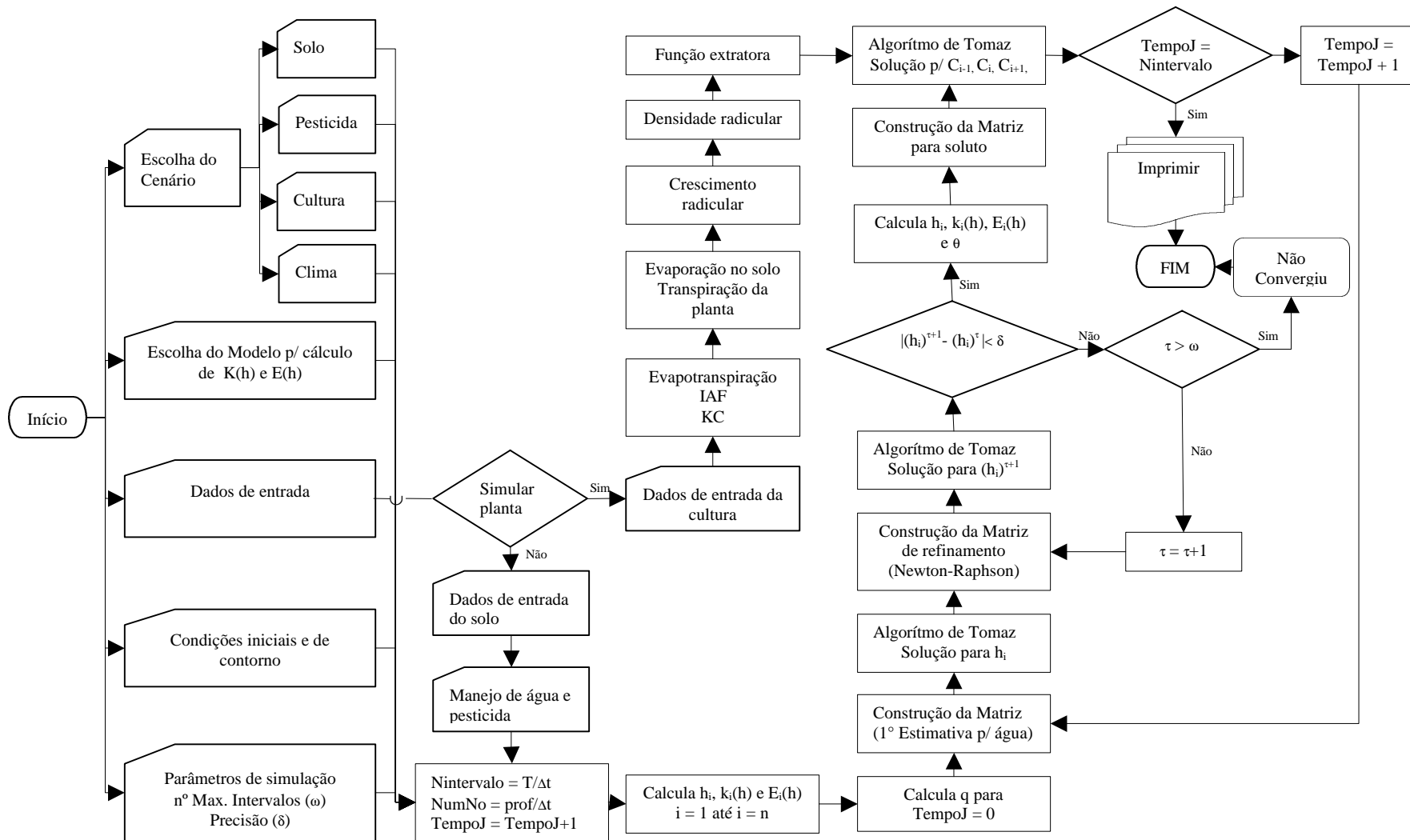


Figura 2.3.3 - Fluxograma do programa HIDROSOLO

2.3.2 – Experimento de campo

Os testes de campo foram conduzidos no período de 30 de julho a 18 de outubro de 2002, numa área experimental de 12 por 12 metros dentro do campus da Universidade Federal de Viçosa (UFV), localizada numa meia encosta próximo ao Laboratório de Mecanização do Departamento de Engenharia Agrícola, conforme ilustrado pela Figura 2.3.4.

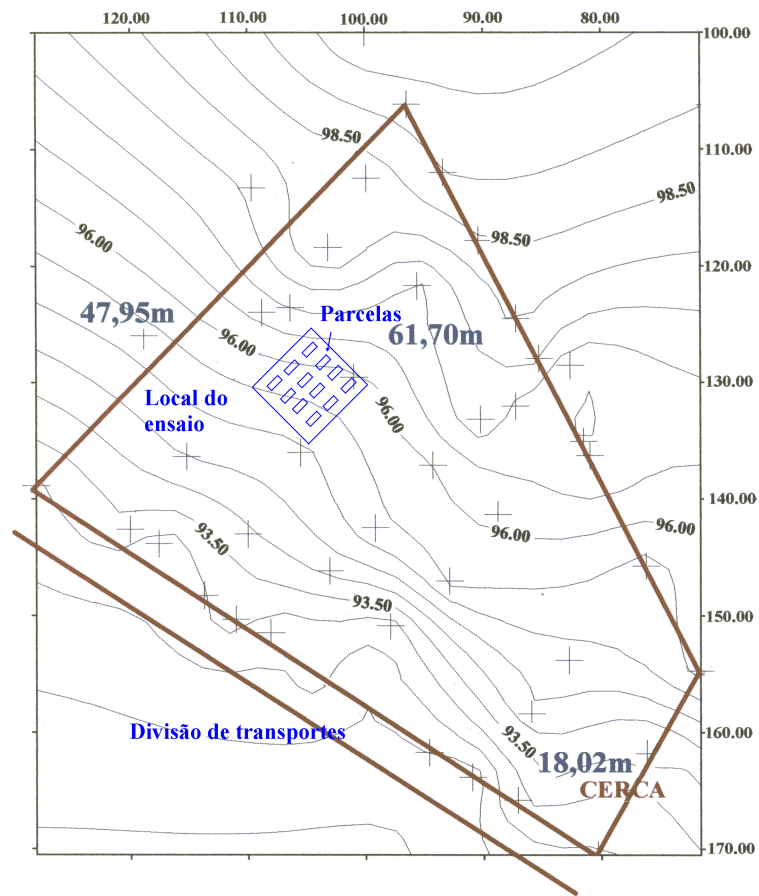


Figura 2.3.4 – Localização da área experimental

2.3.2.1 – Caracterização da área experimental

A classificação do solo da área experimental foi feita utilizando uma trincheira de 1,8 metros de profundidade já existente no local. Segundo KER¹ e NUNES², o solo foi classificado como Cambissolo Háplico Tb Distrófico latossólico, dividido em cinco horizontes denominados: horizonte A de 0 a 13 cm de profundidade; horizonte AB de 13 a 26 cm de profundidade; horizonte BA de 26 a 48 cm; horizonte B₁ de 48 a 75 cm e o horizonte B₂ de 75 a 100 cm. Para a caracterização física, química, textural e físico-hídrica do solo, foram feitas amostragens em cada horizonte. Testes de infiltração foram realizados utilizando o método do infiltrômetro de anéis para determinação da taxa de infiltração estável, possibilitando assim, escolher as intensidades de precipitação utilizadas no experimento. O valor da taxa de infiltração estável (Tie) foi 4,1 cm h⁻¹.

2.3.2.2. Caracterização química e granulométrica

As análises química e granulométrica foram realizadas no laboratório de solos do Núcleo de Ciências Agrárias (NCA-UFMG) em Montes Claros. Na Tabela 2.3.1 são apresentadas as frações de areia fina e grossa, silte e argila total, assim como a classificação textural.

Tabela 2.3.1 – Análise granulométrica e classificação textural do Cambissolo Háplico

Horizonte	Prof. (cm)	Areia grossa	Areia fina	Silte	Argila	Classificação textural
	 %		
A	0 – 13	32,0	26,0	16,0	26,0	Textura média
AB	13 – 26	26,0	34,0	30,0	10,0	Arenosa
BA	26 – 48	24,0	36,0	16,0	24,0	Textura média
B1	48 – 75	19,0	27,0	22,0	32,0	Textura média
B2	75 - 100	16,0	42,0	20,0	22,0	Textura média

¹ Comunicação pessoal (Professor João Carlos Ker, Departamento de Solos, UFV)

² Comunicação pessoal (Walder Antônio Gomes de Albuquerque Nunes, Doutorando em Ciências do Solo, Departamento de Solos, UFV)

Segundo os dados apresentados na Tabela 2.3.1, verifica-se que o solo apresenta textura média na maioria dos horizontes estudados, não apresentando gradiente textural. Em relação ao complexo sortivo (Tabela 2.3.2), o solo apresentou um baixo valor de CTC para todos os horizontes, indicando baixo poder de retenção de cátions. A saturação de bases é baixa e nos horizontes superiores a saturação por alumínio é maior que 50 %, razão pela qual pode-se denominá-lo de epiálico. Os baixos níveis de P indicam tratar-se de solo composto por material bastante intemperizado, com destaque para os óxidos, levando a uma forte fixação de P. Os teores de matéria orgânica são médios até cerca de 45 cm de profundidade, o que, aliado à textura média, indica ser um solo de boa estruturação física.

2.3.2.3. Caracterização físico-hídrica do solo

As propriedades físico-hídricas determinadas foram: massa específica do solo, massa específica de partículas, porosidade, curva de retenção de água no solo, condutividade hidráulica do solo saturado. Essas análises foram realizadas no Laboratório de Água e Solo do Departamento de Engenharia Agrícola da UFV.

Para a obtenção da condutividade hidráulica do solo saturado foi feita uma adaptação da metodologia proposta por OLIVIERA et al. (1999). Foram retirados blocos indeformados (Figura 2.3.4) de cada horizonte da trincheira da área experimental. Desses blocos foram retiradas colunas indeformadas de 10 cm de altura e 5 cm de diâmetro moldada com auxílio de espátula, canivete e tubos de PVC bipartidos, também de cinco centímetros de diâmetro. Uma vez moldadas, as colunas foram transferidas para o centro de um tubo de PVC de 7,5 cm de diâmetro e, aproximadamente 15 cm de altura, tendo sua extremidade inferior vedada por uma chapa de PVC. A união da chapa com o tubo de 7,5 cm foi feita com fita adesiva. Em seguida, foi colocado parafina líquida (aproximadamente 60 °C) entre o tubo e a coluna de solo. Após algumas horas de resfriamento da coluna, a mesma foi retirada do molde e acertada para uma altura de 10 cm (Figuras 2.3.4). Em cada coluna foi instalado um tubo de 7,5 cm de diâmetro e 10 cm de altura na extremidade superior com o objetivo de permitir a formação da carga hidrostática sobre a coluna de solo.

Vazamentos ocorridos entre a parafina e esse tubo de PVC foram corrigidos com a utilização de massa plástica vedante. Na extremidade inferior da coluna foi colocado um pedaço de Bidin e uma tela para evitar a perda de solo durante a execução das análises (Figura 2.3.5). Foram montadas 10 colunas para cada horizonte.

Após a montagem das colunas, as mesmas foram colocadas para saturar por um período de 48 horas. Em seguida, as colunas foram montadas em permeômetros de carga constante para a determinação da condutividade hidráulica do solo saturado e a obtenção dos pontos da curva de eluição, simultaneamente (Figura 2.3.5). Estabeleceu-se uma carga hidrostática de, aproximadamente, cinco centímetros de água no topo da coluna por um período de aproximadamente 24 horas. Esse tempo foi necessário para que ocorresse uma acomodação das partículas no interior da coluna e, conseqüentemente, a estabilização do fluxo.



Figura 2.3.5 – Preparação e montagem de colunas indeformadas de solo e montagem do permeômetro de carga constante para determinação da condutividade hidráulica e dos parâmetros de transporte

Na Tabela 2.3.3 estão apresentados os valores de massa específica do solo, massa específica de partículas, umidade de saturação (igual à porosidade total) e condutividade hidráulica do solo saturado, assim como sua classificação segundo FERREIRA (1999).

Tabela 2.3.3 – Parâmetros físico-hídricos dos horizontes do Cambissolo Háplico

Horizonte	r_s	r_p	q_s	K_o	Classificação
	---- g cm ³ ----		cm ³ cm ³	cm h ⁻¹	
A	1,32	2,53	0,478	14,74	Rápida
AB	1,33	2,68	0,504	10,8	Moderadam. Rápida
BA	1,32	2,67	0,506	1,62	Moderadam. lenta
B1	1,35	2,67	0,494	1,37	Moderadam. lenta
B2	1,38	2,73	0,495	1,27	Moderadam. lenta

Apesar do solo analisado não apresentar gradiente textural para a maioria dos horizontes, uma ligeira inversão no conteúdo de areia fina e argila (Tabela 2.3.1), juntamente com um rearranjo dessas partículas em profundidade, pode explicar a variação da condutividade hidráulica saturada no perfil do solo como pode ser observado na Tabela 2.3.3.

A partir dos dados de umidade versus pressão, obtidos no extrator de Richards, foram ajustados os parâmetros dos modelos de van Genuchten e Brooks-Corey que descrevem a curva de retenção e condutividade hidráulica do solo. Os parâmetros potencial de entrada de ar ' h_b ', lambda ' λ ' e umidade residual ' θ_r ' do modelo de Brooks-Corey (Equação 2.2.24) foram obtidos usando o modelo computacional desenvolvido neste trabalho e os parâmetros ' α ', ' n ' e ' θ_r ' do modelo de van Genuchten (Equação 2.2.30) foram obtidos mediante a utilização do programa "RET C", desenvolvido por van GENUCHTEN et al. (1991). Na Tabela 2.3.4 estão apresentados os valores desses parâmetros para cada horizonte do solo da área experimental.

Tabela 2.3.4 – Parâmetros dos modelos de Brooks-Corey e van Genuchten para o Cambissolo Háplico

Horizonte	Brooks-Corey			Van Genuchten		
	hb	l	q _r	a	n	q _r
	cm		cm ³ cm ⁻³			cm ³ cm ⁻³
A	42,67	0,6636	0,192	0,0369	1,443	0,176
AB	33,94	0,5578	0,213	0,0231	1,622	0,216
BA	48,81	0,5900	0,241	0,0206	1,524	0,235
B1	56,00	0,4936	0,245	0,0096	1,798	0,260
B2	71,20	0,8457	0,296	0,0073	2,329	0,299

Nas Figuras 2.3.6 e 2.3.7 estão representadas as curvas de retenção de água no solo e da condutividade hidráulica no solo não saturado, para cada horizonte, respectivamente, utilizando os modelos acima descritos. Pela Figura 2.3.6 observa-se que os dois modelos descrevem satisfatoriamente as curvas de retenção de umidade, comparados com os dados observados.

Nos trabalhos desenvolvidos por ALEXANDER e SKAGGS (1986) e TIMM et al., (1995), o modelo de van Genuchten subestimou a condutividade hidráulica, para os solos por eles avaliados, e o modelo de Brooks-Corey superestimou quando valores de umidade se encontram próximos à saturação e subestima para condições de baixa umidade.

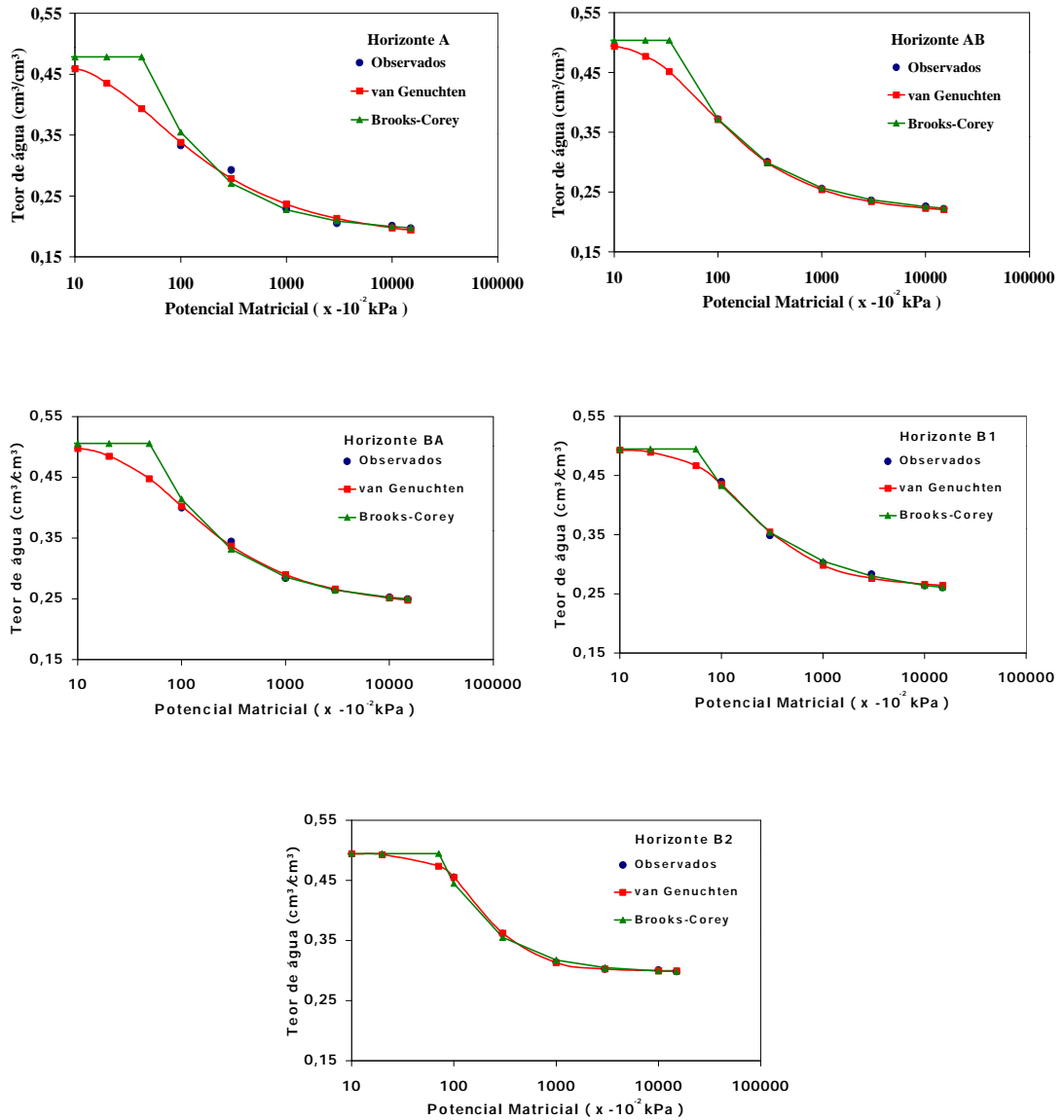


Figura 2.3.6 – Curvas de retenção de água estimadas usando os modelos de van Genuchten e Brooks-Corey.

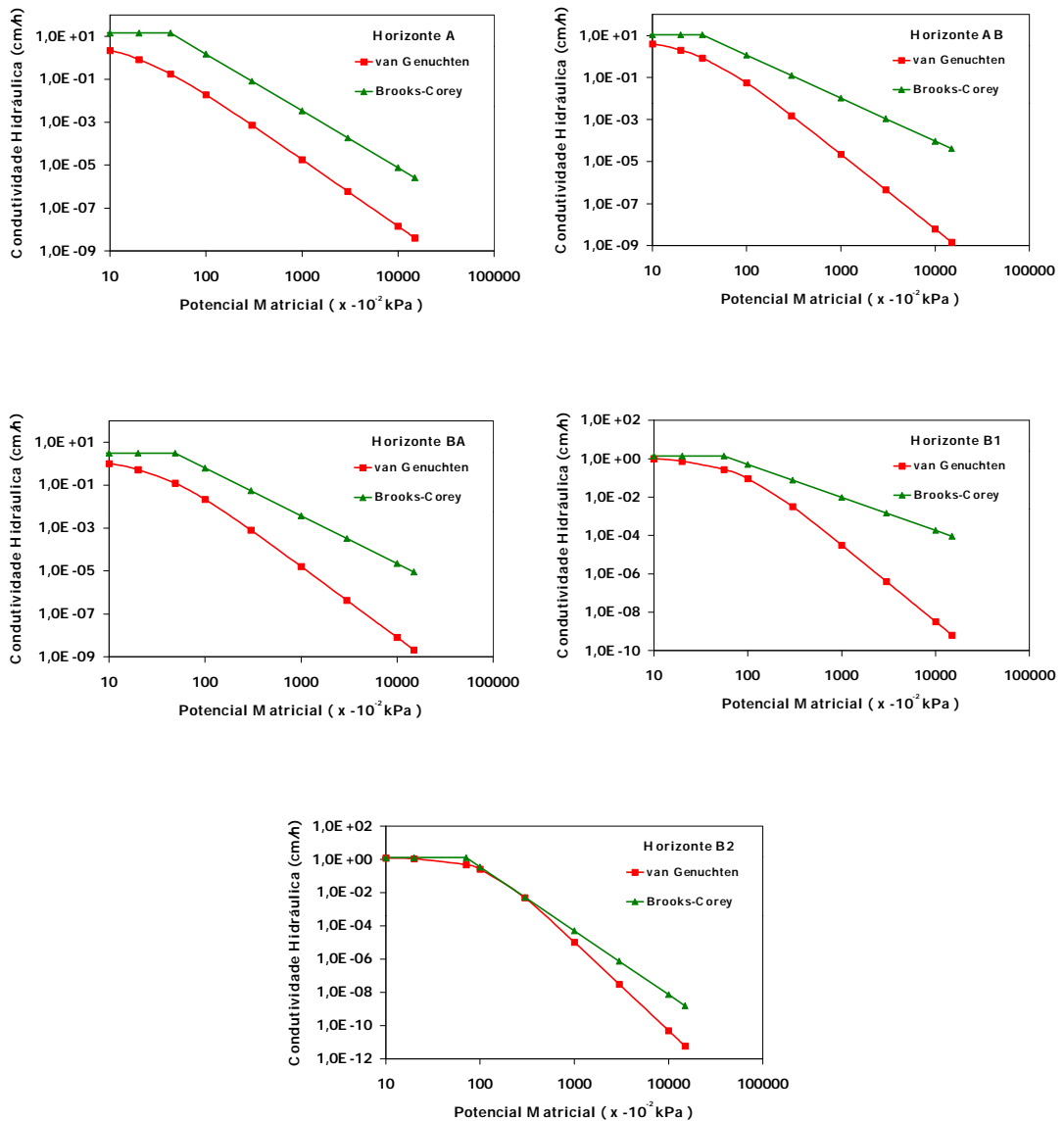


Figura 2.3.7 – Curvas de condutividade hidráulica do solo não saturado estimadas usando os modelos de van Genuchten e Brooks-Corey.

2.3.2.4. Parâmetros de transporte do Carbofuran no solo

O pesticida utilizado para testar o modelo foi o Carbofuran, pelo fato de se ter uma metodologia de extração e quantificação ajustada e avaliada por VIEIRA et al. (2000), o que resultou numa redução de custos e menor demanda de tempo.

O Carbofuran (Figura 2.3.8) é um inseticida, acaricida e nematicida do grupo dos Carbamatos (TOMLIN, 1995), com classificação toxicológica I (altamente tóxico). Sua molécula é instável em meio alcalino e estável em meio ácido, possui DL₅₀ em torno de 0,02 g/kg de peso vivo de mamíferos se ingerido via oral. Embora esse princípio ativo não seja recomendado por técnicos e agrônomos, produtores rurais insistem no seu uso devido à sua relativa eficiência no controle de nematóides e no tratamento de sementes.

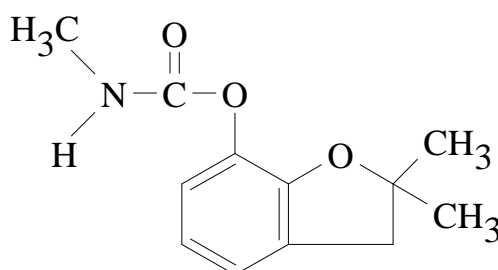


Figura 2.3.8- Estrutura molecular do Carbofuran (2,3-diidro-2,2-dimetilbenzofuran-7-il-metil carbamato) (IUPAC) ou 2,3-dihidro-2,2-dimetil-7-benzofuranil metilcarbamato (CA).

Os principais parâmetros desse princípio ativo, utilizados nas simulações, são apresentados na Tabela 2.3.5.

Tabela 2.3.5 – Principais parâmetros físico-químicos do Carbofuran cadastrados no modelo

Princípio Ativo	Koc (m ³ /kg)	Peso Molec. (g/mol)	Solub (g/m ³)	Pres. vapor (Pa)	t_{1/2} (dia)
Carbofuran	0,02	221	351	0,00008	50

2.3.3.4.2. Extração e análise do resíduo de carbofuran em amostras de solo

Antes de iniciar a extração do resíduo de Carbofuran do solo, as amostras foram descongeladas e, em seguida, peneiradas em malha de 2 mm, para remover pedras, raízes e material mais grosseiro, sendo posteriormente retiradas 50 g (peso seco). Foi utilizado, para as análises de resíduo, o cromatógrafo líquido (HPLC), marca Shimadzu, modelo Class-LC10.

a) Extração

As amostras de 50 g (peso seco) foram colocadas em erlenmeyer de 250 mL, onde foram adicionados 150 mL de acetonitrila, e submetidas a agitação mecânica por 30 minutos. Logo após, o material foi filtrado a vácuo em filtros Whatman n° 5. O filtro foi lavado com mais 50 mL de acetonitrila. Em seguida, o material filtrado foi submetido à evaporação do solvente em evaporador rotatório, a uma temperatura menor ou igual a 35°C, para evitar o risco de decomposição da substância. O resíduo foi recuperado com 3 mL de diclorometano e transferido com uma pipeta de Pasteur para um tubo de ensaio, onde foi evaporado à temperatura ambiente e protegido de luz até a secura total. No momento da análise, o resíduo foi recuperado com 5 mL de fase móvel, sendo homogeneizado em ultrassom e filtrado em filtro de membrana de 0,2 µm Millex (Millipore).

b) Quantificação

As análises de resíduo, foram realizadas por HPLC com coluna C-18, modelo Zorbax ODS (4,6 mm x 25 cm), marca DuPont, com porosidade de 5 µm.

Para a quantificação pelo HPLC foram utilizados os seguintes parâmetros utilizados por VIEIRA et al. (2000) adaptados às condições do Laboratório de Agroquímica da Embrapa Milho e Sorgo de Sete Lagoas, MG:

- eluente ou fase móvel: água-acetonitrila (50:50);
- vazão: 1mL/min;
- volume de injeção: 10 µL;
- detector: ultravioleta a 280 nm; e
- tempo de retenção: cerca de 5 minutos.

Antes de serem iniciadas as análises de resíduo das amostras de solo foi realizado o teste denominado “branco” com amostras de solo coletadas no local do ensaio de campo e nas mesmas profundidades para verificação de possíveis interferentes.

A Figura 2.3.9 apresenta um exemplo de um cromatograma obtido na quantificação do Carbofuran em solo.

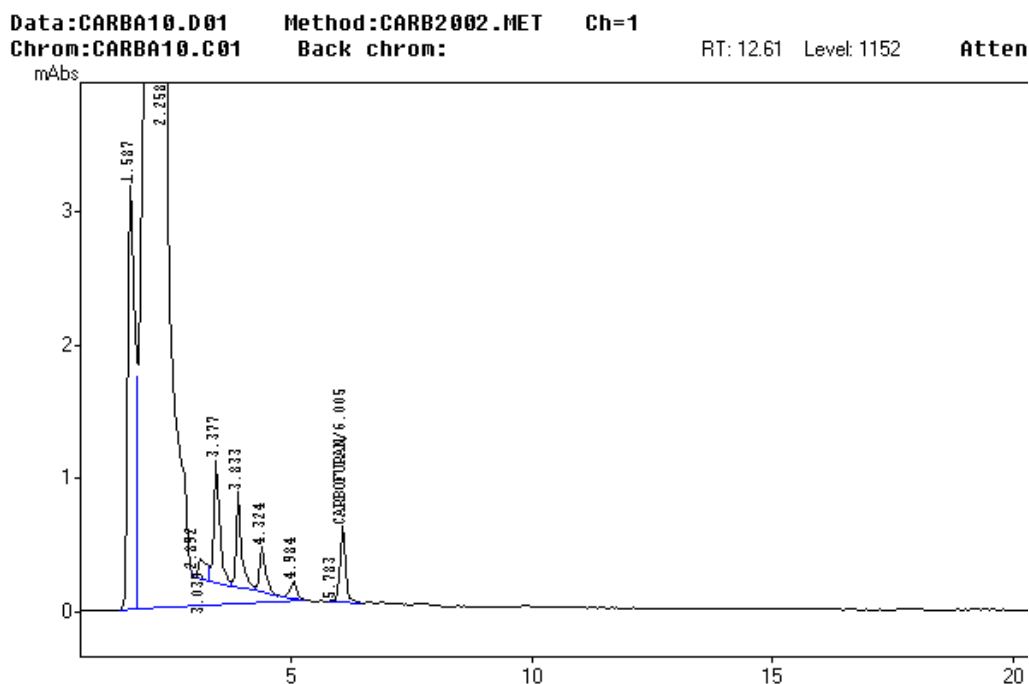


Figura 2.3.9 – Esquema de um cromatograma obtido na quantificação do Carbofuran em HPLC

2.3.3.4.3. Determinação dos parâmetros de transporte do Carbofuran no solo

As mesmas colunas utilizadas na determinação da condutividade hidráulica do solo saturado foram utilizadas para determinação dos parâmetros de transporte do pesticida no solo. Logo após estabilização do fluxo de água na coluna, procedeu-se a troca da água do topo da mesma por uma solução contendo $3,6 \mu\text{g/L}$ do pesticida, com carga hidrostática de mesma altura da anterior.

Para a obtenção dos pontos da curva de efluente, foi feito um teste preliminar no qual verificou-se que seriam necessárias coletas de no máximo 1,5 volumes de poros (V_p) para se obter toda a curva de efluente, ou seja, a concentração relativa (relação entre a concentração da alíquota e a concentração da inicial da solução C/C_0) igual a 1. Foram coletados 10 alíquotas de aproximadamente 4,5 mL ($0,05 V_p$) e 10 alíquotas de 10 mL ($0,1 V_p$) para todas as colunas.

Durante a obtenção das alíquotas, tanto o frasco de mariote quanto a mangueira permeâmetro foram mantidos cobertos com papel alumínio para reduzir a fotodecomposição do pesticida.

As alíquotas coletadas foram acondicionadas em frasco âmbar de 30 mL e armazenadas em geladeira até o momento das análises. As extrações dos

resíduos do pesticida das amostras de solo foram feitas utilizando a metodologia proposta por VIEIRA et al. (2000) no laboratório de Química do Núcleo de Ciências Agrárias da Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG), campus de Montes Claros, MG.

Os parâmetros de transporte como o fator de retardamento (FR) e o coeficiente de dispersão-difusão (D), foram obtidos baseado nos pontos da curva de eluição e na utilização do programa “DISP” (BORGES JUNIOR e FERREIRA, 2002) desenvolvido no Departamento de Engenharia Agrícola da UFV. A dispersividade (δ) do solo foi calculada por meio da Equação 2.2.45 utilizando o valor de 0,0179 $\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$ para a difusão molecular em água, segundo SHEARER et al. (1973) e JURY et al. (1983). O coeficiente de partição (K_d) foi obtido por meio da Equação 2.2.56 e do fator de retardamento. Os valores desses parâmetros são apresentados na Tabela 2.3.6.

Tabela 2.3.6 –Parâmetros de transporte do pesticida no Cambissolo Háplico

Horizonte	D ($\text{cm}^2 \text{h}^{-1}$)	FR (ads)	d (cm)	K_d ($\text{cm}^3 \text{g}^{-1}$)
A	77,72	0,558	2,22	0,061
AB	53,81	0,615	1,86	0,084
BA	15,60	0,565	2,84	0,045
B ₁	12,01	0,512	2,74	0,013
B ₂	9,80	0,512	2,08	0,013

2.3.4. Montagem do ensaio de campo para teste do modelo

Na área experimental foram instaladas 12 parcelas no sentido da declividade do terreno, sendo cada parcela com 2 metros de comprimento por 1 metro de largura (Figura 2.3.10). Essas parcelas foram delimitadas por chapas de folhas de flanders de 0,25 m de altura, cravadas no solo até 0,15 m, tendo no final da parcela uma calha para conduzir e recolher os sedimentos e a água transportada pelo escoamento superficial.



Figura 2.3.10 – Vista de uma parcela experimental

2.3.4.1. Lâminas aplicadas

Foram utilizadas duas intensidades de precipitação sendo que uma seria baixa o suficiente para proporcionar apenas a infiltração da água no solo, sem a ocorrência de escoamento superficial, e outra de alta intensidade para proporcionar infiltração e o escoamento superficial. Essas intensidades foram baseadas nas propriedades físico-hídricas do solo.

A maior intensidade, que correspondeu à uma lâmina de 45 mm aplicada em uma hora, foi obtida utilizando um dispositivo apresentado na Figura 2.3.10. Esse dispositivo foi elaborado e avaliado no Laboratório de Hidráulica da UFV e construído com tubo de PVC de uma polegada de diâmetro, perfazendo um circuito fechado de 2,40 metros de comprimento por 1,20 metro de largura. A pressão de serviço foi controlada por meio de um manômetro de Bourdon e uma válvula de gaveta de uma polegada instalada na entrada do sistema e antes de um filtro de 150 mesh. Foram utilizados quatro bocais de microaspersores setoriais azuis, marca

DEN, de 90°, instalados próximos de cada curva na tubulação de maior comprimento e dois bocais setoriais verdes, marca DEN, de 180°, na metade do espaçamento dos bocais anteriormente citados. Foram feitos vários testes variando pressão e a altura do dispositivo em relação ao solo até se obter a combinação que apresentasse o melhor desempenho em campo, avaliado por meio do coeficiente de uniformidade de Christiansen e coeficiente de uniformidade de distribuição. A intensidade e a uniformidade de precipitação foram obtidas por meio de uma malha de coletores distribuídos dentro da parcela experimental. O Apêndice 1 apresenta as condições de operação do dispositivo para a pressão de serviço que proporcionou melhor desempenho e o perfil de distribuição de água dentro da parcela. O dispositivo foi fixado no campo com auxílio de estacas posicionando-o a 0,7 metros da superfície do solo (Figura 2.3.11).

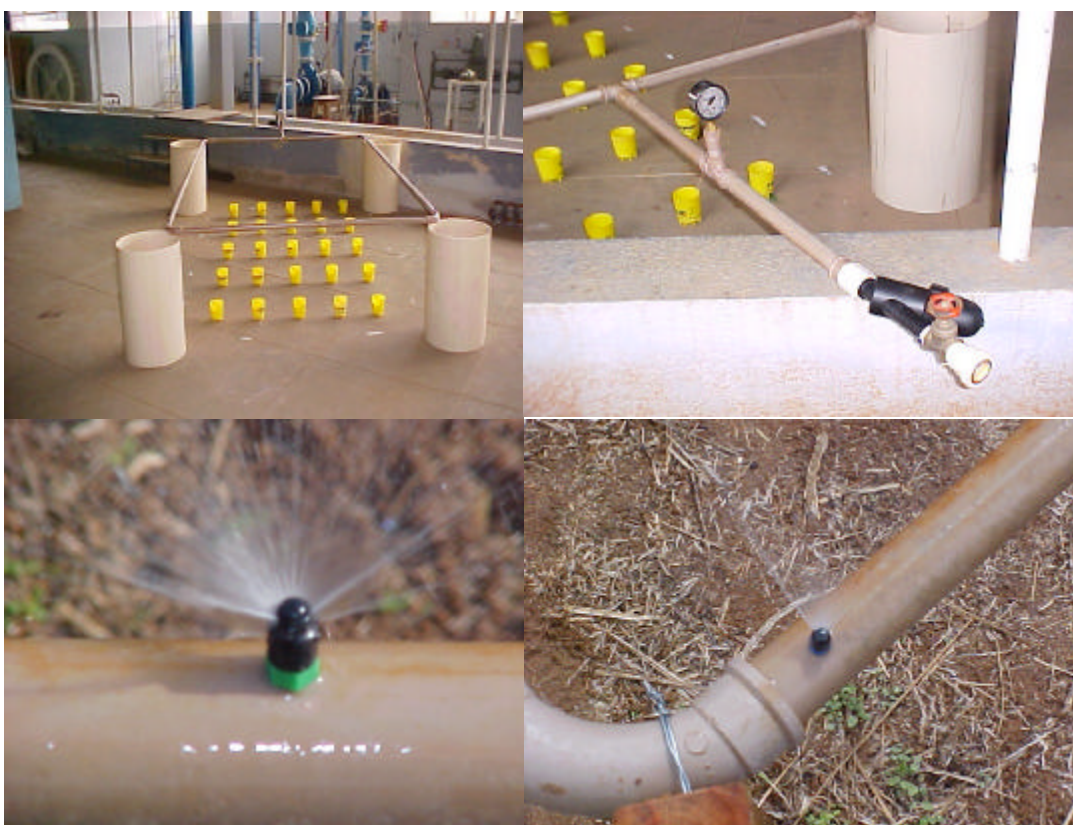


Figura 2.3.11 – Dispositivo desenvolvido para aplicação de água em alta intensidade

O uso desse dispositivo fez-se necessário devido à alta taxa de infiltração apresentada pelo solo e pela facilidade que proporcionou na coleta das lâminas do escoamento superficial nas parcelas individualizadas.

A menor intensidade, que correspondeu à aplicação de uma lâmina de 18 mm em uma hora, foi obtida por meio de um sistema de irrigação convencional, com o qual foram realizados vários testes de uniformidade com vários modelos e marcas de aspersores variando a pressão, até se obter o de mais elevado CUC e CUD. Foram feitas avaliações do sistema de irrigação variando parâmetros como, intensidade de aplicação, pressão de serviço e vazão. O aspersor escolhido e com o melhor desempenho em campo foi 5024 bocal Azul, com diâmetros de 3,5 mm, de fabricação da NAAN, o qual tem suas características de operação apresentadas no Apêndice 2 juntamente com o perfil de distribuição de água. Foram instalados nove aspersores espaçados de 6 metros a uma altura de 1,5 metros tendo o controle da pressão feito por meio de um manômetro de Bourdon instalado na linha de alimentação. A intensidade e a uniformidade de precipitação foram obtidas por meio de uma malha de coletores distribuídos de um em um metro por toda a área experimental (Figura 2.3.12).



Figura 2.3.12 – Análise de uniformidade de distribuição e da intensidade de aplicação da lâmina de irrigação utilizando a aspersão convencional na área experimental

2.3.4.2. Diferenciação das parcelas

O experimento montado em campo foi constituído de quatro tratamentos com três repetições cada. Seis parcelas foram cultivadas com a cultura do feijoeiro, utilizando-se a variedade Pérola, sendo a sementeira efetuada em plantio direto, sem aração do solo, em duas linhas de plantio, com aproximadamente 15 sementes por metro. A adubação de plantio correspondeu a 300 kg ha⁻¹ de NPK. As outras seis parcelas não foram cultivadas. Em cada um dos dois grupos (com e sem cultura) a metade foi submetida à precipitação com uma alta intensidade para provocar o escoamento superficial e a outra metade com uma intensidade menor de modo a ocorrer apenas infiltração. A aplicação do Carbofuran, em todas as parcelas, foi feita no dia 07/08/2002, seguindo a recomendação técnica de rótulo para a cultura do feijoeiro (20 kg/ha do produto comercial da formulação granulada) correspondendo a 20 µg do ingrediente ativo para cada parcela, espalhados e incorporados na camada superficial do solo (cerca de 1 cm). Imediatamente após a aplicação do pesticida, iniciou-se a irrigação das parcelas as quais receberiam lâmina de 45 mm. Depois da irrigação das seis parcelas com lâmina de 45 mm, as mesmas foram cobertas com um anteparo revestido de lona preta e procedeu-se a aplicação, nas outras seis parcelas, da lâmina de 18 mm utilizando a aspersão convencional (Figura 2.3.13). A cada nova irrigação, repetia-se este procedimento, deixando as parcelas cobertas apenas na hora da irrigação convencional. As aplicações de água foram feitas sem seguir um manejo de irrigação. Uma semana antes do início dos ensaios, foram realizadas sucessivas irrigações da área como forma de uniformizar a umidade do perfil. Foram realizadas amostragens de solo para o acompanhamento da condição do teor de água do solo no dia da implantação do experimento e nos dias de amostragem do solo para análise de resíduo do Carbofuran. Após a última amostragem de solo para determinação de resíduo foram coletadas amostras do solo a 6, 12, 24 e 48 horas após a última irrigação, realizada no dia 16/10/2002, para fins de determinação do teor de água.

A Figura 2.3.14 apresenta o cronograma da aplicação de água e retirada das amostras desde a aplicação do pesticida até o último dia do ensaio de campo.



Figura 2.3.13 – Aplicação das diferentes lâminas de irrigação

Para determinação da distribuição do pesticida no perfil do solo, foram coletadas amostras, com auxílio de um trado, para análise de resíduo na profundidade correspondente à metade da camada dos cinco horizontes anteriormente classificados e a 2, 9, 16, 35 e 70 dias após a aplicação do pesticida. Esse período abrange a meia vida do pesticida utilizado.

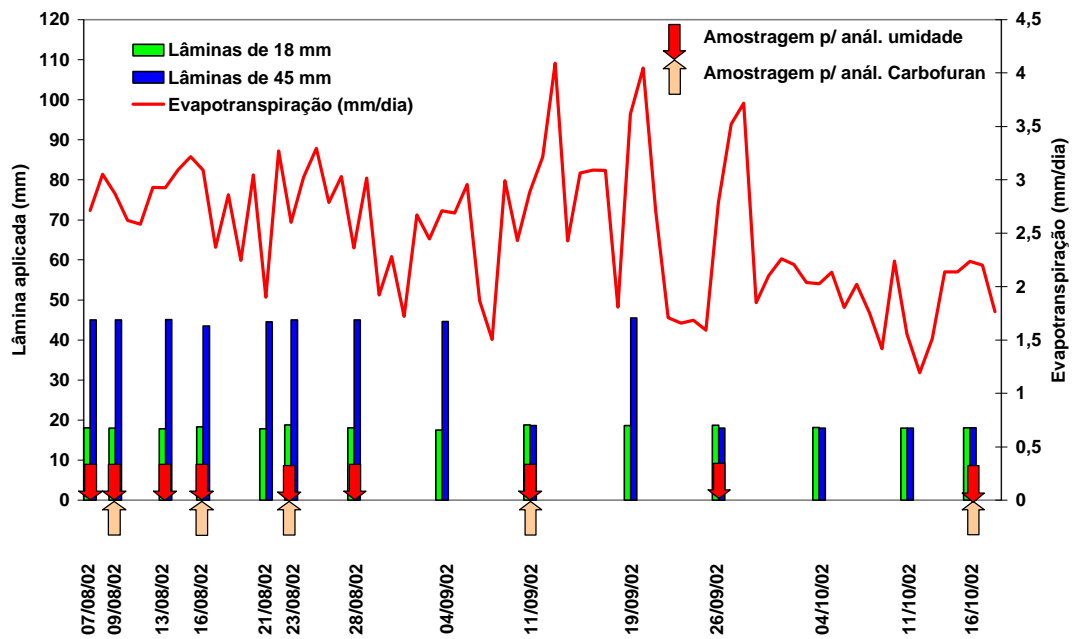


Figura 2.3.14- Cronodiagrama das atividades de campo e a evapotranspiração durante a realização do experimento

Amostras de solo foram acondicionadas em sacos plásticos escuros e mantidas à temperatura de - 4° C, até o momento das análises. Amostras de água foram acondicionadas em frascos de vidro na cor âmbar e refrigeradas, para análise no máximo em 48 horas.

2.3.4. Teste do modelo

A comparação entre os dados simulados e os experimentais foi feita por meio da raiz quadrada do erro médio, RMSE (Root mean square error), proposto por LOAGUE et al. (1989).

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum (P_i - O_i)^2}{n_o}} \quad (2.3.97)$$

em que:

O = valores obtidos experimentalmente;

P = valores simulados; e

n_o = número de observações.

2.4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

2.4.1. Análise dos dados experimentais da concentração do Carbofuran no escoamento superficial

O escoamento superficial ocorreu apenas na quarta irrigação (16/08) nas parcelas submetidas à aplicação das lâminas de 45 mm. O intervalo de tempo entre o início do experimento e a primeira ocorrência do escoamento superficial, pode ser explicado pelo pequeno tempo de aplicação de água, apesar da alta intensidade, e pelo tempo necessário para o surgimento do selamento superficial, o que visualmente pôde ser detectado na área. Deve ser ressaltado que todas as parcelas tiveram a camada superficial submetida ao preparo do solo, seja para o plantio do feijão ou para a incorporação do Carbofuran.

Nas Figuras 2.4.1 e 2.4.2 estão apresentadas os hidrogramas e a concentração do Carbofuran obtido no escoamento superficial. As parcelas com cultura apresentaram valores das lâminas de escoamento próximas aos das parcelas sem cultura. Esse fato está relacionado ao pequeno desenvolvimento da cultura do feijoeiro no dia da primeira ocorrência do escoamento superficial. Isso implicou numa exposição da camada superficial do solo aos fatores envolvidos no processo de escoamento de água e arraste de sedimentos, semelhante às parcelas sem cultura.

A concentração do Carbofuran no escoamento superficial apresentou um comportamento semelhante ao verificado nos hidrogramas, isto é, ocorreu um

aumento da concentração do pesticida com o aumento da lâmina escoada decorrente do aumento da capacidade de transporte do escoamento superficial, transportando de forma crescente o princípio ativo do pesticida. Os grânulos do produto comercial do pesticida, localizado na superfície do solo, pode, de certa forma, ter apresentado um taxa crescente de dissolução, liberando o Carbofuran para que parte fosse lixiviada no perfil do solo e parte transportada em solução no escoamento superficial.

Em alguns pontos a variação da concentração do carbofuran acompanha a variação da lâmina escoada, conforme pode ser verificado nas Figuras 2.4.1 e 2.4.2.

Das seis parcelas submetidas à lâmina que proporcionaram escoamento superficial, apenas quatro apresentaram resíduo do Carbofuran na água escoada. Isso pode estar relacionado com as baixas concentrações do pesticida detectadas nas amostras de água do escoamento e o limite de detecção do HPLC que está em torno de $0,004 \mu\text{g mL}^{-1}$.

Nenhuma inferência pode ser feita em relação à concentração do Carbofuran no escoamento superficial entre as parcelas com e sem cultura, pois as plantas apresentavam-se com pequeno desenvolvimento no dia da amostragem desse escoamento.

Segundo LEONARD (1990) o transporte de um pesticida por escoamento superficial não é tão previsível como o ocorrido por lixiviação, no qual tem-se como base as propriedades físico-químicas da molécula. O transporte de pesticidas pelo escoamento superficial é muito dependente de características da superfície do solo, condições climáticas e topografia. Nesse processo, pouco importa se, propriedades do pesticida como K_d ou K_{oc} apresentem valor baixo ou elevado, pois o mesmo poderá ser transportada tanto sorvido às partículas do solo como livre na solução escoada.

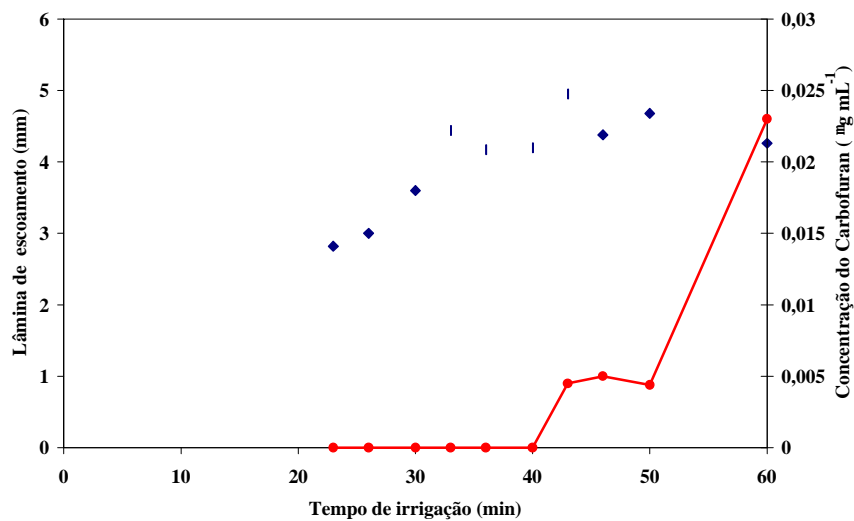
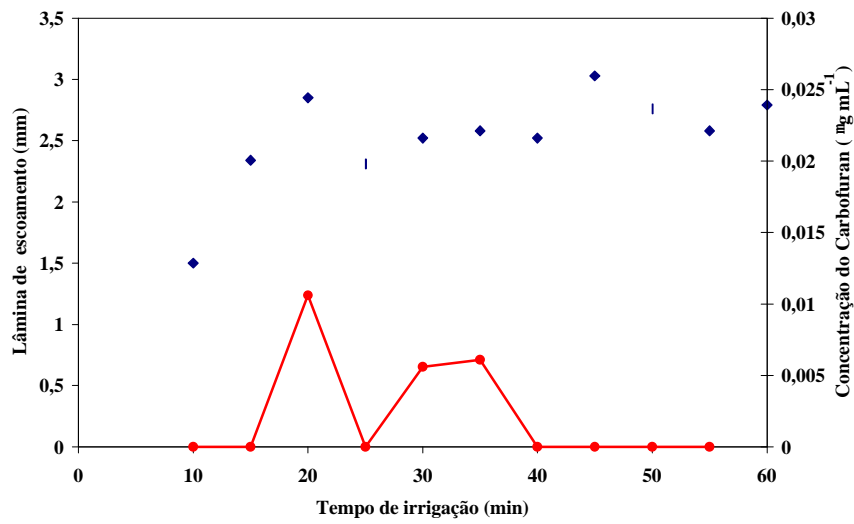
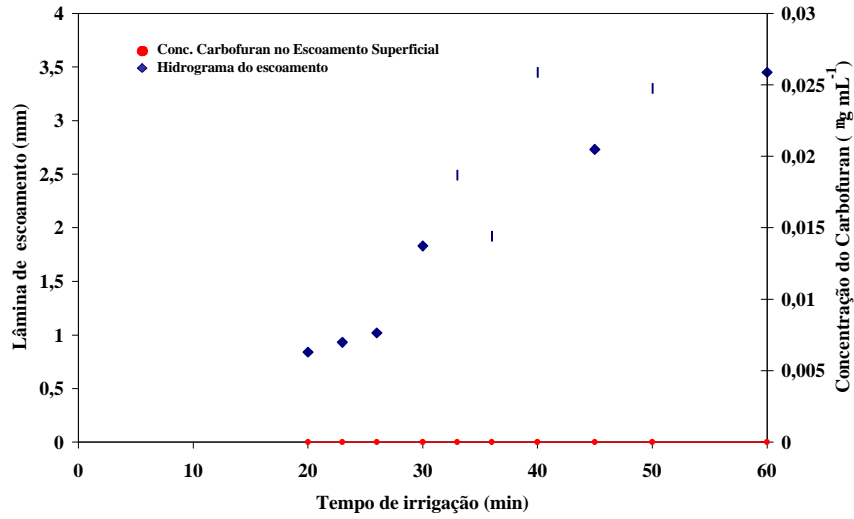


Figura 2.4.1. Hidrogramas e a concentração do Carbofuran no escoamento superficial para as parcelas com cultura, nas repetições 1, 2 e 3, respectivamente

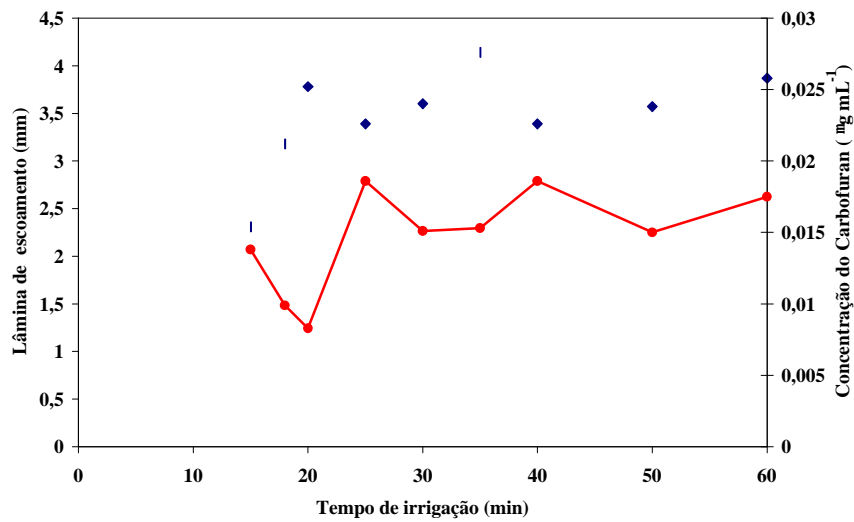
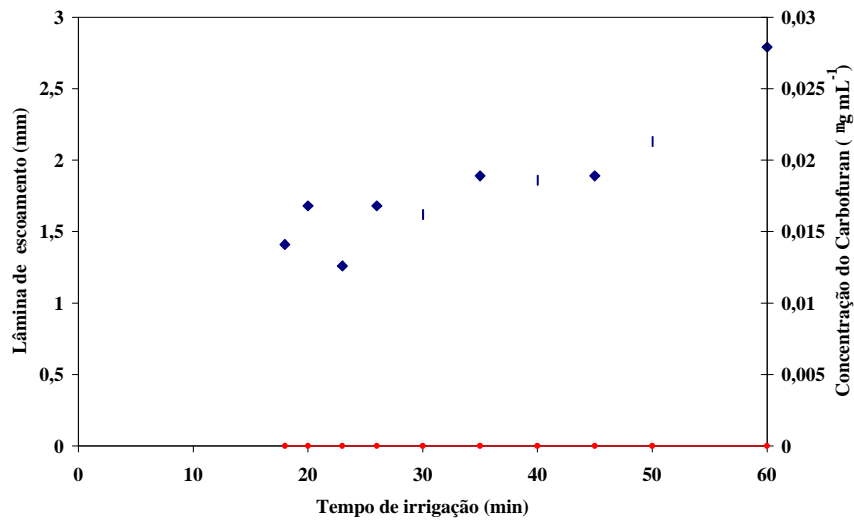
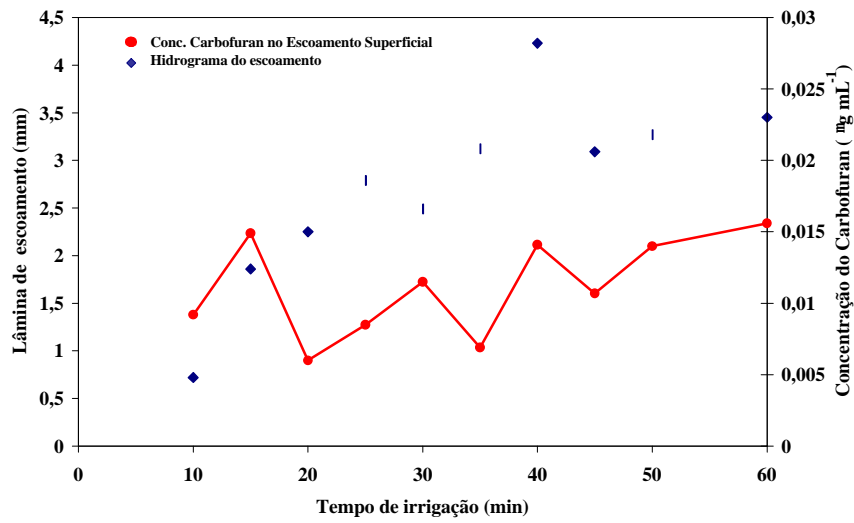


Figura 2.4.2. Hidrogramas e a concentração do Carbofuran no escoamento superficial para as parcelas sem cultura, nas repetições 1, 2 e 3, respectivamente

2.4.2. Análise dos dados experimentais de distribuição de umidade e Carbofuran no perfil do solo

Nas Tabelas 2.4.1 e 2.4.2 estão apresentados os valores médios, os coeficientes de variação e os intervalos de confiança, em nível de 90% de probabilidade, das umidades para os cinco horizontes do solo da área experimental, nas diferentes datas de amostragem. Nessas Tabelas estão apresentadas apenas as umidades dos dias em que foram coletadas amostras para determinação do resíduo de Carbofuran, conforme o cronograma apresentado na Figura 2.3.13.

As médias de umidade do dia 07/08 (Tabela 2.4.1) referem-se aos valores de umidade consideradas como condição inicial do ensaio de campo, não havendo distinção entre os tratamentos. Nesse dia, foram coletadas amostras em seis pontos distintos dentro da área experimental. As médias das umidades obtidas no dia 9/08 de agosto referem-se à média de 6 parcelas (agrupamento das parcelas com e sem cultura). A diferenciação entre os tratamentos, sem e com cultura, iniciou-se a partir da 3ª amostragem (16/08), quando a cultura havia, então, germinado. Desta forma, na Tabela 2.4.2 estão apresentadas as médias de umidade a partir da terceira data de amostragem.

Tabela 2.4.1- Valores médios do teor de água no perfil do solo nas parcelas sem cultura e seus respectivos coeficientes de variação e intervalo de confiança

Data da amostragem	Horizonte	Lâmina aplicada na irrigação					
		18 mm			45 mm		
		q_m cm ³ cm ⁻³	IC cm ³ cm ⁻³	CV %	q_m cm ³ cm ⁻³	IC cm ³ cm ⁻³	CV %
Inicial 07/08/2003	A	0,339	±0,0130	4	0,339	±0,0130	4
	AB	0,353	±0,0031	1	0,353	±0,0031	1
	BA	0,382	±0,0090	2	0,382	±0,0090	2
	B₁	0,412	±0,0096	2	0,412	±0,0096	2
	B₂	0,418	±0,0052	1	0,418	±0,0052	1
09/08/2003	A	0,313	±0,0363	12	0,346	±0,0147	4
	AB	0,341	±0,0125	4	0,340	±0,0164	5
	BA	0,390	±0,0141	4	0,358	±0,0215	6
	B₁	0,394	±0,0131	3	0,388	±0,0129	3
	B₂	0,409	±0,0125	3	0,409	±0,0212	5
16/08/2003	A	0,355	±0,0070	2	0,342	±0,0277	9
	AB	0,356	±0,0076	2	0,359	±0,0175	5
	BA	0,371	±0,0229	7	0,383	±0,0126	3
	B₁	0,382	±0,0174	5	0,390	±0,0132	4
	B₂	0,410	±0,0077	2	0,412	±0,0176	5
23/08/2003	A	0,333	±0,0176	6	0,365	±0,0162	5
	AB	0,355	±0,0257	8	0,365	±0,0168	5
	BA	0,381	±0,0237	7	0,399	±0,0154	4
	B₁	0,401	±0,0154	4	0,410	±0,0172	4
	B₂	0,422	±0,0128	3	0,403	±0,0184	5
11/09/2003	A	0,287	±0,0133	5	0,283	±0,0174	6
	AB	0,302	±0,0183	6	0,312	±0,0115	4
	BA	0,345	±0,0176	5	0,353	±0,0236	7
	B₁	0,378	±0,0056	2	0,371	±0,0072	2
	B₂	0,386	±0,0047	1	0,381	±0,0053	1
16/10/2003	A	0,261	±0,0187	8	0,275	±0,0130	5
	AB	0,281	±0,0291	11	0,312	±0,0124	4
	BA	0,353	±0,0188	6	0,347	±0,0056	2
	B₁	0,366	±0,0076	2	0,380	±0,0060	2
	B₂	0,383	±0,0030	1	0,389	±0,0124	3

θ_m – Teor médio de água
CV – Coeficiente de variação
IC – Intervalo de confiança

Tabela 2.4.2- Valores médios do teor de água no perfil do solo nas parcelas com cultura e seus respectivos coeficientes de variação e intervalo de confiança

Data da amostragem	Horizonte	Lâmina aplicada na irrigação					
		18 mm			45 mm		
		q_m cm ³ cm ⁻³	IC cm ³ cm ⁻³	CV %	q_m cm ³ cm ⁻³	IC cm ³ cm ⁻³	CV %
16/08/2003	A	0,341	±0,027	9	0,345	±0,030	9
	AB	0,350	±0,017	5	0,349	±0,018	6
	BA	0,369	±0,022	7	0,378	±0,012	3
	B ₁	0,381	±0,017	5	0,391	±0,014	4
	B ₂	0,401	±0,007	2	0,411	±0,018	5
23/08/2003	A	0,335	±0,036	12	0,341	±0,037	12
	AB	0,351	±0,023	7	0,350	±0,018	6
	BA	0,360	±0,022	7	0,369	±0,014	4
	B ₁	0,380	±0,015	4	0,410	±0,017	4
	B ₂	0,408	±0,012	3	0,403	±0,014	4
11/09/2003	A	0,293	±0,020	7	0,290	±0,026	10
	AB	0,315	±0,018	6	0,300	±0,014	5
	BA	0,337	±0,018	6	0,349	±0,023	7
	B ₁	0,365	±0,006	2	0,369	±0,007	2
	B ₂	0,386	±0,008	2	0,381	±0,005	1
16/10/2003	A	0,263	±0,021	8	0,280	±0,013	5
	AB	0,272	±0,026	10	0,310	±0,012	4
	BA	0,313	±0,017	6	0,333	±0,009	3
	B ₁	0,360	±0,007	2	0,383	±0,006	2
	B ₂	0,384	±0,003	1	0,400	±0,014	4

q_m – Teor médio de água

CV – Coeficiente de variação

IC – Intervalo de confiança

Analisando-se os valores apresentados nas Tabelas 2.4.1 e 2.4.2, verifica-se uma maior variação dos valores das médias das umidades nos horizontes superficiais, os quais apresentam os coeficientes de variação mais altos, atingindo um máximo de 12%. Essa variação deve-se, provavelmente, à variabilidade espacial das propriedades físico-hídricas e químicas, principalmente das camadas superficiais do solo. Um exemplo dessa variabilidade é o conteúdo da matéria orgânica, o qual está diretamente relacionado com a retenção de água no solo. Já nos horizontes mais profundos, ocorreu uma menor variação do teor de água em torno da média, o que é

confirmado pelos baixos valores dos coeficientes de variação, apresentando-se menor que 5%. Pelos baixos valores dos coeficientes de variação, as umidades do perfil do solo, obtidas experimentalmente, podem ser consideradas satisfatórias para serem empregadas no teste do modelo computacional.

Nas Tabelas 2.4.3 e 2.4.4 estão mostrados as concentrações de Carbofuran no perfil do solo, para os quatro tratamentos utilizados nesse trabalho. Nas duas primeiras amostragens (dia 9 e 16/08) foram detectados maiores quantidades de Carbofuran, em todo o perfil do solo, nas parcelas onde foram aplicadas lâminas de irrigação de 45 mm. Porém, a partir da terceira amostragem, as parcelas com 18 mm de irrigação, apresentaram maiores valores do pesticida na camada superficial. Isso pode ser explicado pela alta hidrofobicidade do produto e pelo transporte do mesmo no escoamento superficial proporcionado pela lâmina de 45 mm. A hidrofobicidade está relacionada com as propriedades físico-químicas da molécula do Carbofuran, principalmente com o baixo valor do coeficiente de partição (K_d) e alta solubilidade (Tabela 2.3.5). Quanto maior a hidrofobicidade, maior será a tendência do pesticida ser lixiviado no perfil do solo. Entretanto, outros atributos físicos, químicos e biológicos do solo, destacando a estrutura, a classe textural, a mineralogia, o conteúdo de matéria orgânica, pH, CTC, atividade e biomassa microbiana, refletem diretamente na movimentação desse pesticida no perfil do solo (ENFIELD et al. 1990). Conforme apresentado nas Figuras 2.4.1 e 2.4.2, o escoamento superficial também possibilitou a retirada do Carbofuran do sistema analisado. Com isso, a redução da concentração de Carbofuran na camada superficial detectada a partir da terceira amostragem, está relacionada com uma parte do pesticida que apresentou maior lixiviação e, conseqüentemente, maior distribuição no perfil e uma outra parte, retirada do sistema pelo escoamento superficial. Houve, porém, uma menor movimentação do pesticida nas parcelas em que foram aplicadas lâminas de 18 mm, fazendo com que o pesticida apresentasse maiores quantidades nas camadas superficiais, a partir da terceira amostragem (23/09). Esse mesmo caso ocorre nas parcelas com e sem cultura.

Nas duas últimas amostragens (11/09 e 16/10), as parcelas com cultura apresentaram menores quantidades do pesticida no perfil, o que pode estar representando a extração do mesmo pelo sistema radicular das plantas, visto que o Carbofuran é um produto sistêmico.

Tabela 2.4.3 - Valores médios de concentração de Carbofuran no perfil do solo nas parcelas sem cultura e seus respectivos coeficientes de variação e intervalo de confiança

Data da amostragem	Horizonte	Lâmina aplicada na irrigação					
		18 mm			45 mm		
		C _m µg cm ⁻³	CV %	IC µg cm ⁻³	C _m µg cm ⁻³	CV %	IC µg cm ⁻³
09/08/2003	A	0,2922	90	±0,1761	1,2558	135	±1,1414
	AB	0,0462	30	±0,0092	0,2929	81	±0,1585
	BA	0,0320	63	±0,0135	0,0409	60	±0,0165
	B ₁	0,0018	87	±0,0011	0,0290	17	±0,0033
	B ₂	0,0024	19	±0,0003	0,0192	15	±0,0020
16/08/2003	A	0,6237	156	±0,9234	3,0291	169	±4,8565
	AB	0,3842	79	±0,2867	1,2341	88	±1,0307
	BA	0,0246	60	±0,0140	0,4750	83	±0,3748
	B ₁	0,0051	40	±0,0019	0,0381	70	±0,0254
	B ₂	0,0022	45	±0,0009	0,0408	50	±0,0196
23/08/2003	A	1,0884	82	±0,8459	0,3138	95	±0,2844
	AB	0,2037	29	±0,0567	0,3884	32	±0,1164
	BA	0,0278	31	±0,0082	0,0603	63	±0,0360
	B ₁	0,0292	64	±0,0178	0,0610	49	±0,0286
	B ₂	0,0067	12	±0,0008	0,0735	22	±0,0152
11/09/2003	A	0,2182	129	±0,2672	0,0046	173	±0,0076
	AB	0,0317	166	±0,0498	0,0003	173	±0,0005
	BA	0,0095	109	±0,0098	0,0025	133	±0,0031
	B ₁	0,0022	90	±0,0019	0,0017	95	±0,0015
	B ₂	ND	ND	ND	0,0003	173	±0,0005
16/10/2003	A	0,0098	120	±0,0011	0,0018	150	±0,0025
	AB	0,0065	143	±0,0088	0,0024	155	±0,0036
	BA	ND	ND	±0,0000	0,0019	ND	±0,0027
	B ₁	ND	ND	ND	ND	ND	ND
	B ₂	ND	ND	ND	ND	ND	ND

C_m – Concentração média
 CV – Coeficiente de variação
 IC – Intervalo de confiança
 ND – Não detectado

Tabela 2.4.4- Valores médios de concentração de Carbofuran no perfil do solo nas parcelas com cultura e seus respectivos coeficientes de variação e intervalo de confiança

Data da amostragem	Horizonte	Lâmina aplicada na irrigação					
		18 mm			45 mm		
		q _m µg cm ⁻³	IC µg cm ⁻³	CV %	q _m µg cm ⁻³	IC µg cm ⁻³	CV %
16/08/2003	A	0,3011	±0,3360	118	1,3422	±1,0204	80
	AB	0,8453	±0,6196	77	0,3549	±0,1426	42
	BA	0,0272	±0,0281	109	0,5687	±0,3254	60
	B ₁	0,0247	±0,0185	79	0,0255	±0,0120	50
	B ₂	0,0447	±0,0255	60	0,0618	±0,0265	45
23/08/2003	A	0,6718	±0,5263	83	0,1674	±0,1737	109
	AB	0,3800	±0,1578	44	0,1676	±0,1167	73
	BA	0,0369	±0,0049	14	0,1261	±0,0980	82
	B ₁	0,0060	±0,0018	31	0,0379	±0,0168	47
	B ₂	0,0024	±0,0002	10	0,0892	±0,0585	69
11/09/2003	A	0,0027	±0,0023	89	0,0017	±0,0027	173
	AB	0,0078	±0,0093	124	ND	ND	ND
	BA	0,0043	±0,0070	173	0,0003	±0,0005	170
	B ₁	0,0019	±0,0020	114	0,0025	±0,0042	177
	B ₂	0,0005	±0,0008	173	ND	ND	ND
16/10/2003	A	0,0206	±0,0079	40	0,0049	±0,0046	99
	AB	0,0094	±0,0019	21	0,0014	±0,0019	143
	BA	ND	ND	ND	ND	ND	ND
	B ₁	ND	ND	ND	ND	ND	ND
	B ₂	ND	ND	ND	ND	ND	ND

C_m – Concentração média
 CV – Coeficiente de variação
 IC – Intervalo de confiança
 ND – Não detectado

Altos valores de coeficientes de variação foram obtidos em todos os tratamentos e em todo o perfil do solo. Porém, parcelas com e sem cultura e nas intensidades de 18 e 45 mm, apresentaram valores de coeficiente de variação mais altos nas amostragens realizadas próximas à aplicação do Carbofuran, isto é, nos dias 9, 16 e 23/08/2002. Essa variação pode estar relacionada com a formulação granulada do produto, a qual pode ter liberado o produto no solo de forma mais desuniforme. Segundo HIMEL et al. (1990), várias propriedades do ingrediente ativo e sua forma de ação no solo levam os fabricantes a produzirem os diversos tipos de formulação. A formulação granulada do Carbofuran está relacionada com sua alta solubilidade em água, baixa estabilidade em temperatura mais elevada e sua alta miscibilidade. Essa formulação aumenta o tempo de ação do ingrediente ativo nas camadas superficiais, controlando por maior tempo os insetos que atuam nessa camada do solo. Uma desvantagem desse tipo de formulação é a sua maior vulnerabilidade aos processos que regem o escoamento superficial.

Outra explicação para o alto coeficiente de variação nas camadas superficiais para as primeiras amostragens deve-se ao fato de que a distribuição do produto na superfície do solo pode não ter atingido a uniformidade pretendida.

As últimas amostragens apresentaram os mais altos valores de coeficiente de variação em todo o perfil. Este fato está relacionado à maior dificuldade e menor precisão na detecção do Carbofuran em concentrações muito baixas.

2.4.3. Modelo HIDROSOLO

O modelo computacional para o cálculo do índice de lixiviação e de transporte de pesticidas no solo foi denominado “HIDROSOLO”. O modelo foi desenvolvido em linguagem orientada a objeto utilizando a plataforma Delphi 5.0 sendo estruturado em módulos de modo a permitir flexibilidade em seu uso. Apresenta várias interfaces como mostradas nas Figuras 2.4.3 a 2.4.18.

O módulo ‘Potencial de Risco’, apresentado no Capítulo 1, calcula o índice de lixiviação relacionado ao potencial de contaminação de águas subterrâneas.

O módulo ‘Transporte de água e solutos no solo’, simula o movimento de água e o transporte de solutos no perfil do solo.

O HIDROSOLO possui um menu, localizado na parte superior da tela principal, onde é possível acessar todos os cadastros, funções e aplicações do

programa, apresentados na forma de: Arquivo, Cadastro, Cenário, Modelos, Dados de entrada, Condições Iniciais e Contorno, Parâmetros da simulação, Calcular, Resultados e Ajuda. As escolhas feitas pelo usuário estão apresentadas de forma resumida num painel situado ao lado esquerdo da tela principal (Figura 2.4.3).

O ítem 'Cadastro' possui um padrão de navegação, com uma barra de botões o qual permite a visualização dos dados cadastrados, o que facilita ao usuário a familiarizar-se com o programa. Nesse item, estão armazenadas informações na forma de um banco de dados aberto, dos principais componentes que caracterizarão o cenário a ser simulado. Estes componentes ambientais estão representados pelo Pesticida, Solo, Cultura e Clima. Em todos os formulários de cadastro, os dados serão organizados em uma lista, sendo os dados novos inseridos no final desta lista.

No componente 'Produto Químico' é possível armazenar informações referentes às propriedades físicas, químicas e do esquema da estrutura molecular do composto químico identificado pelo nome de seu princípio ativo, grupo químico e classe. As informações necessárias para o preenchimento deste formulário estão apresentadas na Figura 2.4.4.

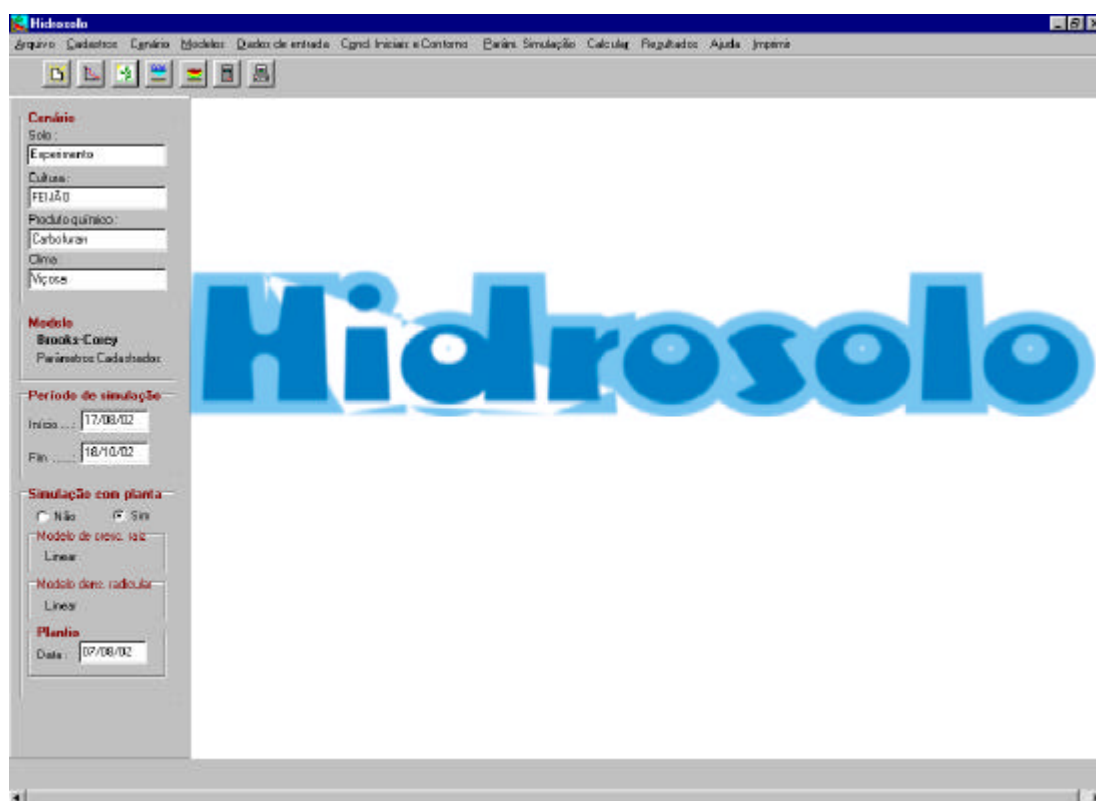


Figura 2.4.3 – Tela principal do modelo HIDROSOLO.

Cadastro do pesticida

Nome do princípio ativo : Carbolaran

Grupo Químico : Carbamato

Classe : Inseticida, nematocida, acaricida, moluscicida

Solubilidade (em água a 20 °C) : 351 mg/L

Pressão de vapor : 6E-5 Pa

Coefficiente de partição (Koc) : 0,04 m²/kg

Meiovida : 76 Dias

Peso molecular : 221 g/mol

Coeff. difusão em água pura : 0,0479 cm²/h

Constante de Henry : 5,2E-5 Ads

Fórmula Química

CC1(C)OCC2=CC=C(C=C2)C(=O)N1

Informações Adicionais:

Fonte: Hornitz et al. 1936.

Anterior Próximo Novo Salvar Apagar Cancelar Sair

Figura 2.4.4 – Formulário de cadastro de pesticidas.

No componente ‘Solo’, além do nome e do local em que se situa o solo, há uma interface onde são armazenados dados referentes às propriedades físico-hídricas superfície do mesmo (Figura 2.4.5), podendo ainda, ser dividido em várias camadas, onde se define a profundidade da mesma e armazena-se os parâmetros físico-hídricos, químicos, textural e de ajuste da curva de retenção de água no solo (Figura 2.4.6). Com isso, independente da escolha do usuário, o HIDROSOLO fará todos os cálculos considerando todas as propriedades físico-hídricas cadastradas para todas as camadas. Caso o usuário deseje trabalhar com um solo homogêneo, basta cadastrar apenas uma camada para todo o perfil de interesse.

No componente ‘Planta’ (Figura 2.4.7), são armazenados dados que estão disponibilizados para o modelo simular, não só a densidade radicular utilizada nos cálculos de extração de água e solutos no solo, mas também o crescimento da planta como um todo, informações de data provável de colheita da cultura em função da data de plantio. Implementações como estimativa da produção da cultura, dada as condições de manejo de água, fertilizantes e pesticidas, poderão ser feitas posteriormente.

Cadastro do solo

Nome: Experimento **Local:** Área de reconexão da UFV

Propriedades da superfície do solo:

Profundidade do solo	15 cm	Condutividade elétrica	2.3 dSm
Taxa de infiltração estável	4.1 cm/h	Ângulo de dispersão em água	12 %
Diâmetro médio do sedimento	0.25 cm	Estabilidade de ângulo	13 %
Erodibilidade do solo	Calcular 0.00174 kg s ⁴ m ⁻¹	Coef. rugosidade de Manning	0.019 ads

Camadas

Anterior Próximo Novo Salvar Apagar Cancelar Sair

Figura 2.4.5 – Formulário de cadastros das propriedades da superfície do solo

Cadastro das camadas do solo

Camada: 1 **Profundidade: de:** 0 **a:** 13 cm

Propriedades físico-hídricas da camada:

Massa específica do solo	1.33 g/cm ³	Umidade na capacidade de campo	0.3861 cm ³ /cm ³
Massa específica dos partículas	2.656 g/cm ³	Umidade no ponto de murcha	0.2325 cm ³ /cm ³
Cond. hidráulica do solo saturado	5.7 cm/h	Umidade residual	0.21 cm ³ /cm ³

Parâmetros de van Genuchten/Brooks e Corey:

Alpha	0.0369 ads	Lambda	0.413587 ads
Valor de n de van Genuchten	1.4433 ads	Potencial de entrada de ar	27.43 cm
Dispersividade	2.218 cm		

Propriedades físico-químicas da camada:

Areia	58 %	pH	5	Fósforo	4.3 cmolc/dm ³
Silte	16 %	Fração Orgânica	0.0264 %	Potássio	27 cmolc/dm ³
Argila	25 %	Alumínio	1.1 cmolc/dm ³	Cálcio	0.7 cmolc/dm ³
		Magnésio	0.3 cmolc/dm ³	H+AL	3.06 cmolc/dm ³

Anterior Próximo Novo Salvar Apagar Cancelar Sair

Figura 2.4.6 – Formulário de cadastros das propriedades físico-hídricas, químicas, textural e de ajuste da curva de retenção.

Figura 2.4.7 – Formulário de cadastro de culturas

No cadastro ‘Clima’ (Figura 2.4.8), o usuário pode armazenar diariamente informações ou importar dados por meio de arquivo com extensão “.TXT”, desde que o formato seja o padrão INMET (Instituto Nacional de Meteorologia), porém sem as colunas de direção de vento, conforme mostrado no item 1.4.1 do capítulo 1. Desta forma, o usuário pode simular o transporte de solutos no solo em tempo real ou simular situações passadas ou futuras. Os usuários podem cadastrar vários locais com série histórica de vários anos.

Figura 2.4.8 - Formulário de cadastro do clima

O modelo HIDROSOLO permite uma flexibilidade de uso, podendo o usuário, rapidamente, alterar o cenário a ser avaliado. Isso pode ser feito utilizando o módulo 'Cenário', onde serão feitas as escolhas dos elementos, os quais comporão o ambiente (Figura 2.4.9).

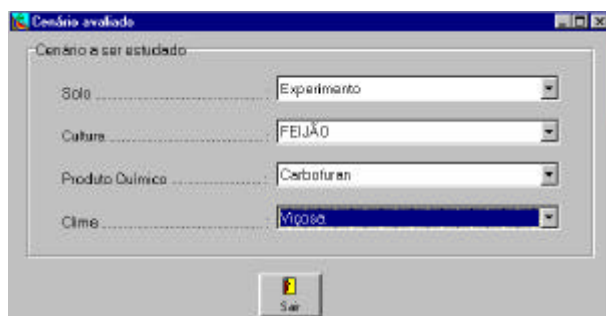


Figura 2.4.9 – Escolha do cenário a ser avaliado

Uma vez escolhido os elementos do cenário a ser avaliado, o usuário terá disponibilizado no modelo, de forma simples e rápida, uma série de informações que possibilitarão calcular o transporte de água e solutos no solo, bastando para isso, entrar com as informações adicionais relativas ao local a ser avaliado, cultura (se for feita a opção da presença de culturas), condições iniciais da simulação e as condições de contorno para a água e o soluto.

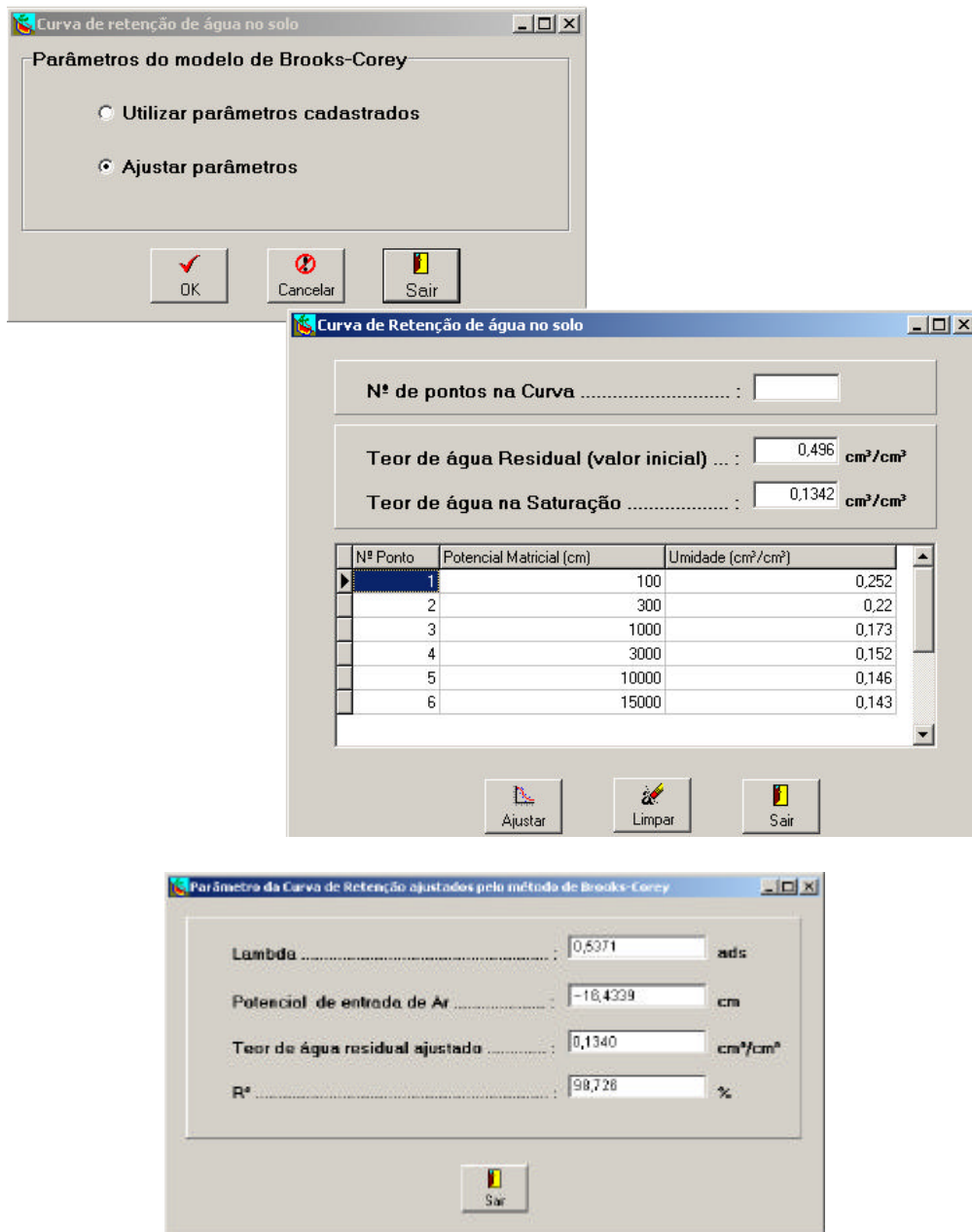


Figura 2.4.10 – Telas referentes a escolha do modelo para o ajuste dos parâmetros da curva de retenção de água no solo

No HIDROSOLO é possível selecionar entre os modelos de van Genuchten e Brooks-Corey para simular a curva de retenção de água no solo e calcular a condutividade hidráulica e a capacidade hídrica específica. O usuário tem, ainda, a opção de usar os parâmetros da curva de retenção fornecidos no cadastro das camadas do solo ou os parâmetros ajustados pelo modelo (Figura 2.4.10).

A Figura 2.4.11 apresenta a tela de entrada de dados relacionados com a discretização espacial do perfil do solo, assim como dados específicos do local onde

se encontra o solo analisado, como coordenadas geográficas, altitude, declividade, comprimento de rampa e outros dados que possibilitarão, numa etapa posterior, calcular o escoamento superficial e suas implicações no transporte de solutos na superfície do mesmo.

Figura 2.4.11 – Tela de entrada de informações específicas do solo analisado

Preenchido o formulário com as informações específicas do solo, o usuário pode definir se a simulação será feita com ou sem a presença de cultura. Uma vez escolhida a opção ‘com cultura’, o usuário terá acesso a um formulário (Figura 2.4.12) onde são definidos os dados referentes ao período de desenvolvimento da cultura, profundidade de plantio, escolha do modelo de cálculo de crescimento e da densidade radicular. Os modelos de crescimento disponíveis são o linear e o exponencial, e os modelos de densidade radicular são o linear e o sigmoidal.

Figura 2.4.12 – Tela de entrada de informações específicas da cultura

No formulário de manejo de água e pesticida (Figura 2.4.13) são fornecidas informações referentes à entrada de água e soluto no sistema analisado. Desta forma, as alterações das condições de contorno são totalmente flexibilizadas e dinâmicas, uma vez que são fornecidos dados referentes ao início e fim de um evento de chuva ou irrigação e início e fim de uma aplicação de pesticida, seja via direta ao solo ou por meio de uma quimigação.

Data	Irrigação (mm/h)	Início (horas)	Fim (horas)	Pesticida (g/h²)	Início (horas)	Fim (horas)
07/08/02	18,5	08:00:00	10:00:00	0	00:00:00	00:00:00
08/08/02	18,5	08:00:00	10:00:00	0	00:00:00	00:00:00
13/08/02	18,5	10:00:00	11:00:00	0	00:00:00	00:00:00
15/08/02	18,5	10:00:00	11:00:00	0	00:00:00	00:00:00
21/08/02	18,5	08:00:00	09:00:00	0	00:00:00	00:00:00
23/08/02	18,5	14:00:00	15:00:00	0	00:00:00	00:00:00
26/08/02	18,5	08:00:00	10:00:00	0	00:00:00	00:00:00
30/08/02	18,5	10:00:00	11:00:00	0	00:00:00	00:00:00
04/09/02	18,5	08:00:00	10:00:00	0	00:00:00	00:00:00

Figura 2.4.13 – Tela de entrada de informações sobre o manejo de água e de aplicação de pesticidas.

Na Figura 2.4.14 está apresentada a tela de entrada das condições iniciais de umidade e da concentração do pesticida analisado. O número de nós de discretização do perfil apresentado por esse formulário é definido na entrada de dados específico

do solo (Figura 2.4.11) no momento em que o usuário define a profundidade do perfil a ser analisado e o número de compartimentos a ser dividido esse perfil.

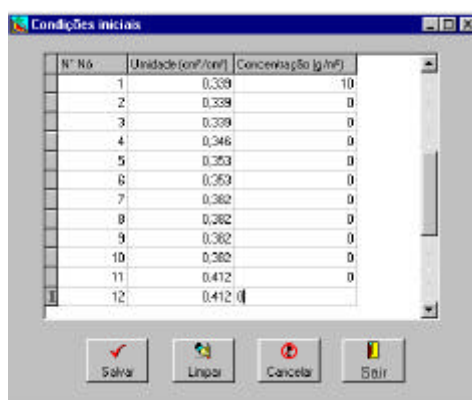


Figura 2.4.14 – Tela de entrada das condições iniciais de água e de pesticida no perfil do solo

As condições de contorno são determinadas pelo usuário por meio das opções: Tipo potencial constante (Dirichlet) ou fluxo (Neuman) para a água (Figura 2.4.15) e Tipo concentração constante (Dirichlet) ou fluxo (Cauchy) para o soluto (Figura 2.4.16). Uma vez escolhida as condições de contorno, o usuário poderá fornecer os valores para os mesmos.

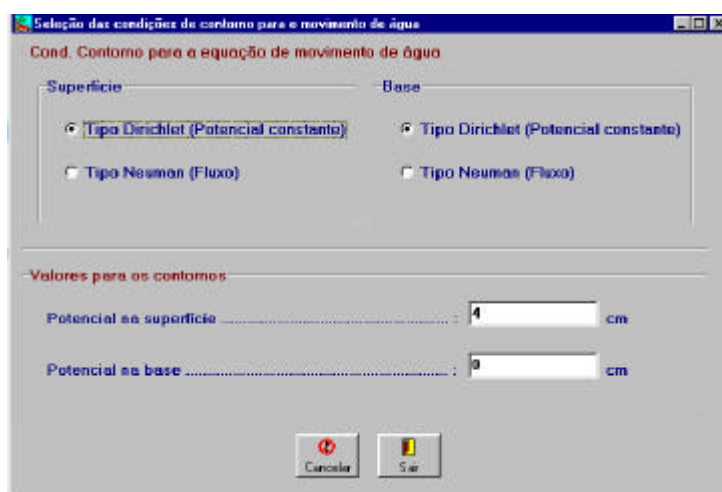


Figura 2.4.15 – Tela de escolha das condições de contorno referentes a água

Essa flexibilidade de escolha das condições de contorno permite ao usuário simular diversas situações, como por exemplo, o processo de infiltração de água no

solo seja em um teste de infiltrômetro ou um tabuleiro de arroz ou mesmo simulação de um permeâmetro, que possuem uma carga hidráulica constante na superfície (potencial constante na superfície) e fluxo na base. Já na simulação de uma quimigação por aspersão convencional, deverá ser selecionado a condição tipo fluxo na superfície e na base, tanto para água quanto para o pesticida. Outra situação possível de ser simulada é a existência de lençol freático numa determinada profundidade, o qual deverá ser selecionada a condição do tipo potencial constante nessa profundidade, assumindo o valor zero.

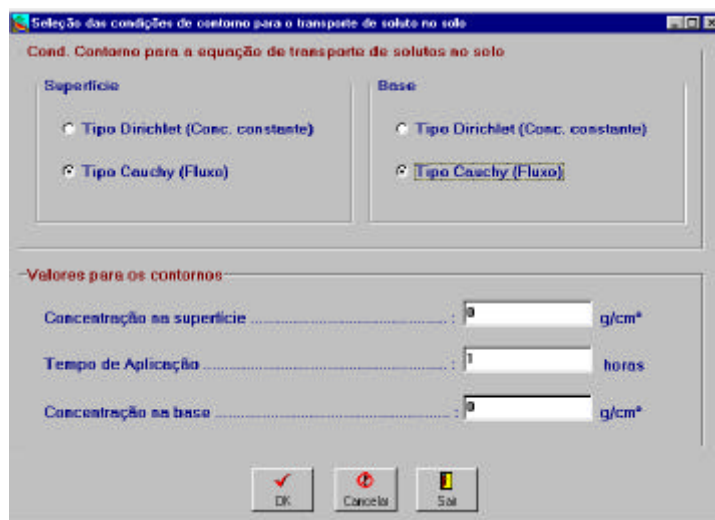


Figura 2.4.16 – Tela de escolha das condições de contorno referentes ao soluto

No formulário dos parâmetros de simulação (Figura 2.4.17) serão definidos a data, hora do início e fim da simulação, a discretização do período simulado, o número máximo de interações e a precisão desejada.

O modelo HIDROSOLO possui um sistema de indexação da data e hora do dia, o que permite monitorar todas as alterações de condições de contorno de superfície, seja na aplicação de água ou do pesticida.

Na Figura 2.4.18 estão apresentados os resultados da simulação para o cenário avaliado na forma de gráficos e tabelas, simultaneamente. O usuário terá, ainda, a opção de escolha dos resultados a serem apresentados, assim como um relatório final contendo um resumo das opções feitas na montagem do cenário e os resultados da simulação.

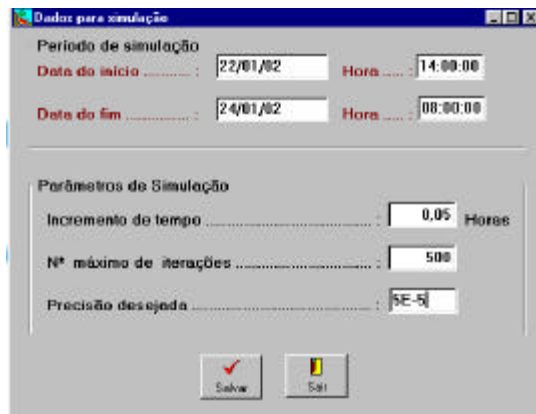


Figura 2.4.17 – Tela de definição dos parâmetros de simulação

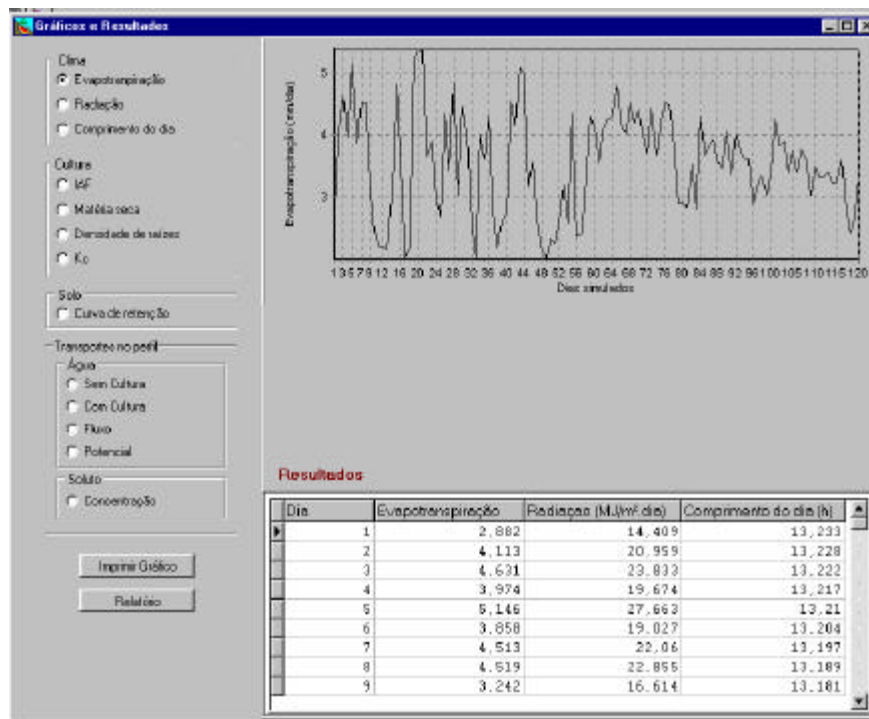


Figura 2.4.18 – Tela de apresentação dos resultados finais da simulação

2.4.4. Avaliação do modelo HIDROSOLO

2.4.4.1. Movimento de água no perfil do solo

Baseado nos parâmetros físico-hídricos do solo da área experimental até a profundidade de 1 metro e nos valores iniciais de umidade, obtido minutos antes de se aplicar as lâminas de irrigação de 18 mm e 45 mm, realizou-se uma série de simulações para verificar os melhores valores de intervalo de tempo (Δt) e de profundidade (Δz) a serem empregados durante todo o teste do modelo. As simulações foram feitas empregando intervalo de tempo de 0,01 h, 0,02 h e 0,05 h e intervalos de profundidade de 2,5 e 5 cm.

Nessas simulações foram utilizados valores médios das propriedades físico-hídricas, devido à alguns problemas ocorridos na mudanças dos valores dessas propriedades quando o modelo procedia a mudança de camadas.

Na Tabela 2.4.5 estão apresentados os valores da raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os perfis simulados e observados. Na simulação da curva de retenção, da condutividade hidráulica do solo e da capacidade hídrica específica, foi utilizado apenas o modelo de Brooks e Corey, em virtude dos melhores ajustes obtidos com estes, quando comparados com os modelos de van Genuchten (ALEXANDER e SKAGSS, 1986; MARTINEZ, 1989; OLIVEIRA (1999) e TIMM (1995).

Tabela 2.4.5 – Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados, para o perfil de umidade, usando o HIDROSOLO, para o modelo de Brooks-Corey, para diferentes Δz 's e Δt 's e lâminas de 18 e 45 mm de água

Dz (cm)	Dt (h)	RMSE	
		18 mm	45 mm
2,5	0,01	0,0459	0,0325
	0,02	0,0465	0,0458
	0,05	0,0607	0,0721
5	0,01	0,0351	0,0244
	0,02	0,0445	0,0499
	0,05	0,0522	0,0478

Pelos valores apresentados na Tabela 2.4.5, observa-se que os menores erros foram obtidos nas simulações utilizando 5 cm para o incremento da profundidade e 0,01 h para o incremento do tempo. Quando foi utilizado $\Delta z = 2,5$ cm, houve tendência do aumento da raiz do quadrado do erro médio. Para as simulações em que foi usado $\Delta z = 5$ cm houve pequena oscilação na estimativa dos erros, porém, sem apresentar tendência específica. Por apresentar os menores erros, o teste do HIDROSOLO foi feito utilizando a discretização do tempo com um $\Delta t = 0,01$ h e a do perfil do solo com $\Delta z = 5$ cm.

Na Figura 2.4.19 estão apresentadas as simulações da variação do perfil do teor de água do solo, feitas pelo HIDROSOLO, após a última irrigação (16/10) no final do ensaio de campo. Foram feitas simulações a cada 20 minutos durante o período de irrigação; a cada duas horas até seis horas após a irrigação e 24 e 48 horas após o início da irrigação (Figura 2.4.19). Na Figura 2.4.19A está mostrado o processo de umedecimento na camada superficial do solo durante o período da irrigação. Analisando-se essa figura, percebe-se, também, a profundidade máxima atingida pela água durante o evento da irrigação. Tomando-se por base os valores do teor de água na saturação (θ_s) e do teor de água atual das duas primeiras camadas do solo em que foi feito o ensaio de campo, os 18 mm aplicados na irrigação permitiria o umedecimento de aproximadamente 20 cm de profundidade do solo, levando-se em conta a umidade imediatamente antes da irrigação. Porém, com a intensidade de aplicação de água de 18 mm h^{-1} , é possível que o solo não tenha atingido a saturação e, portanto, a frente de umedecimento pode atingir menores profundidades. Entretanto, as simulações feitas pelo HIDROSOLO apresentaram variação do teor de água nos primeiros 30 cm de solo, o que pode significar uma superestimativa da movimentação de água. Essas variações podem ser explicadas por um possível erro na obtenção dos dados de umidade do solo.

Pelas Figuras 2.4.19 B e C, percebe-se uma superestimativa do teor de água simulada pelo HIDROSOLO nas primeiras camadas do solo. Esse efeito pode estar sendo provocado por erros na estimativa da evaporação na superfície do solo, representada pelo fluxo no primeiro nó da malha de discretização da região física de estudo, uma vez que se considerou que o fluxo na superfície seria igual à evaporação diária distribuída em 24 horas. Devido a isto, o modelo computacional pode estar subestimando a perda de água. Outra possível explicação para esse comportamento

deve-se ao fato do perfil ter sido considerado homogêneo, não levando em consideração as variações abruptas de algumas propriedades físico-hídricas. Erros na estimativa dos valores da condutividade hidráulica e da capacidade hídrica, próximos à umidade de saturação devem ser levados em consideração e também foram constatadas em outros trabalhos como os de MARTINEZ (1989), TIMM (1995) e OLIVEIRA (1999).

Pela Figura 2.4.19, percebe-se uma boa estimativa do teor de água em profundidades maiores. Esse efeito pode estar relacionado ao fato da condição de contorno considerada no limite inferior da região estar mais próxima das condições reais do processo de movimentação de água.

Para avaliar o comportamento das estimativas da variação do teor de água no perfil do solo em intervalos de tempo maiores, foram simulados perfis de umidade considerando o espaço de tempo compreendido entre a data e hora “aproximada” da retirada das amostras para análise do teor de água inicial do perfil até o momento da retirada da outra retirada de amostra, minutos antes da aplicação das lâminas de irrigação seguintes.

Nas Tabelas 2.4.6 e 2.4.7 estão apresentados os valores da raiz do quadrado médio do erro (RMSE) entre os perfis de umidade observados e os simulados para intervalos de tempo entre amostragens de solo, utilizando as lâminas de 18 e 45 mm, respectivamente, para as parcelas com e sem cultura. Os dados utilizados na obtenção do RMSE foram os valores observados e os valores interpolados da simulação para a mesma profundidade

Em termos de movimentação de água, analisando os valores dos RMSE (Tabelas 2.4.6 e 2.4.7), o modelo apresentou uma oscilação do erro quando se compara os valores obtidos com a aplicação das lâminas de 18 e 45 mm. Entretanto, os valores simulados aproximaram, de forma bastante satisfatória, dos valores observados. Esse mesmo comportamento com relação aos valores do RMSE é verificado quando se compara as simulações com e sem cultura. As simulações para as parcelas com cultura e lâmina de 18 mm apresentaram redução do erro comparadas às simulações para as parcelas sem cultura. A simulação da extração de água pela cultura, ocorrida principalmente nas camadas superficiais, onde o erro era maior, fez com que houvesse uma redução desse erro.

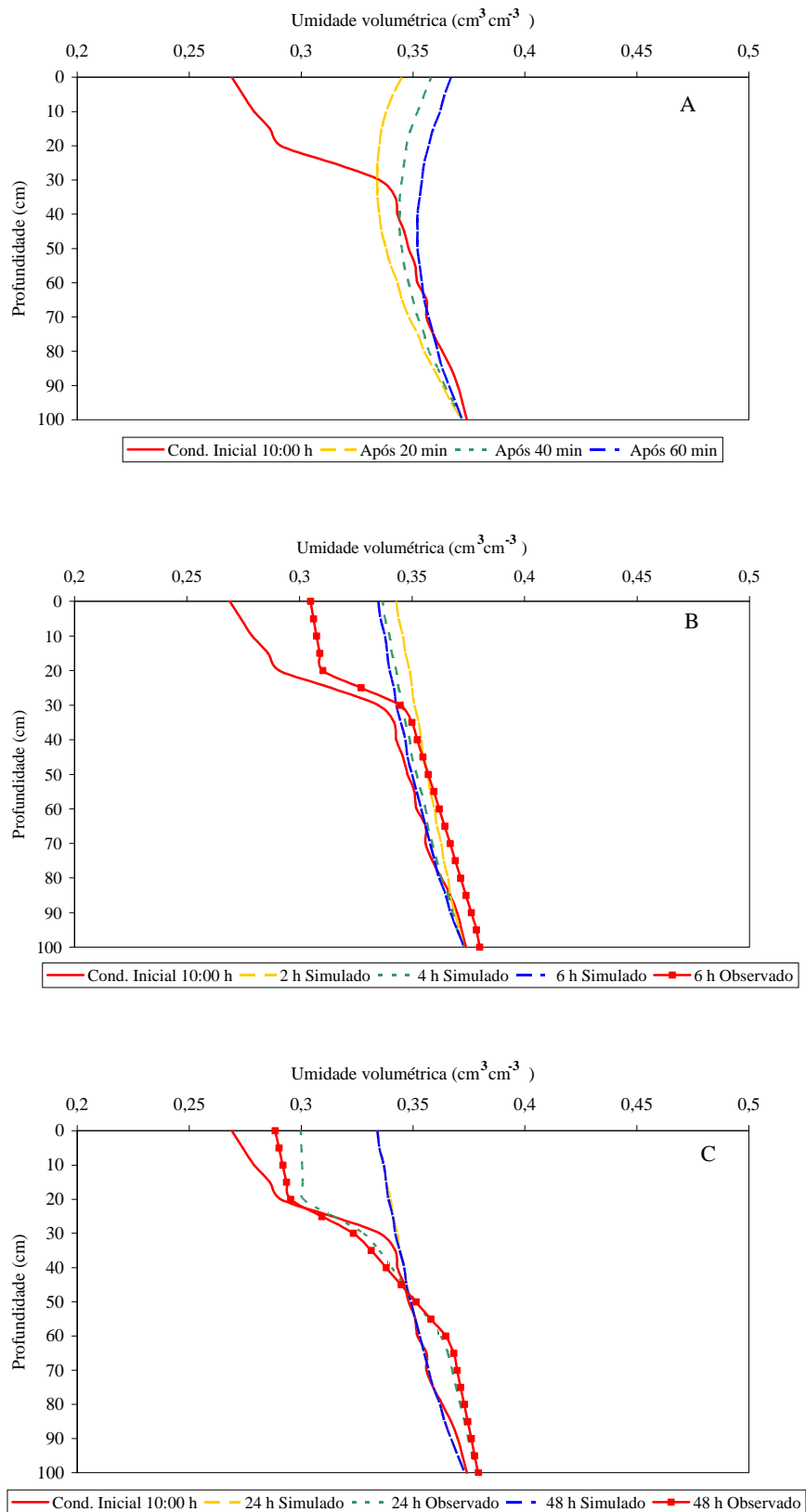


Figura 2.4.19- Perfis de umidade do solo observado e simulados, durante a aplicação da lâmina de 18 mm (A), nas primeiras 6 h (B) e nas primeiras 48 h (C) , após a última irrigação (16/10), para $\Delta z = 5$ cm e $\Delta t = 0,01$ h.

As Figuras 2.4.18 a 2.4.21 estão apresentados os perfis de umidade estimados pelo HIDROSOLO e os obtidos experimentalmente, conforme intervalo de simulação apresentado nas Tabelas 2.4.6 e 2.4.7. Esses perfis foram obtidos considerando condições de contorno do tipo Neuman (fluxo) na superfície e na base.

Além dos resultados do RMSE (Tabelas 2.4.6 e 2.4.7), uma outra forma de se avaliar o desempenho do modelo é inserir os intervalos de confiança em nível de 90 % de probabilidade, conforme sugerido por DOU e FOX (1995). De acordo com LIWANG et al. (1998), a predição do modelo é considerada precisa quando os valores simulados estiverem dentro do intervalo de confiança dos valores experimentais.

Tabela 2.4.6 – Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados, para o perfil de umidade usando, no HIDROSOLO, o modelo de Brooks-Corey, nas parcelas sem cultura

Início da simulação	Fim da simulação	RMSE	
		18 mm	45 mm
07/08/2002 - 9:00 h	09/08/2002 – 9:00 h	0,0255	0,0123
07/08/2002 - 9:00 h	16/08/2002 – 9:00 h	0,0144	0,0165
07/08/2002 - 9:00 h	23/08/2002 – 15:30 h	0,0126	0,0223
16/08/2002 - 9:00 h	11/09/2002 – 9:30 h	0,0328	0,0301
16/08/2002 - 9:00 h	16/10/2002 – 9:30 h	0,0328	0,0371

Tabela 2.4.7 – Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados, para o perfil de umidade usando, no HIDROSOLO, o modelo de Brooks-Corey, nas parcelas com cultura

Início da simulação	Fim da simulação	RMSE	
		18 mm	45 mm
07/08/2002 - 9:00 h	16/08/2002 – 9:00 h	0,0115	0,0189
07/08/2002 - 9:00 h	23/08/2002 – 15:30 h	0,0155	0,0219
16/08/2002 - 9:00 h	11/09/2002 – 9:30 h	0,0246	0,0376
16/08/2002 - 9:00 h	16/10/2002 – 9:30 h	0,0219	0,0261

Nas Figuras 2.4.18 a 2.4.21 percebe-se que o HIDROSOLO tende a simular melhor a umidade nas camadas superiores para pequenos intervalos de simulação.

Isso vem a ressaltar a necessidade de ajustes no processo utilizado pelo HIDROSOLO para considerar a água evaporada da camada superior do solo.

Apesar da melhoria nas previsões com a presença da cultura, ajustes também se fazem necessários para corrigir o fluxo no contorno superior da região física analisada.

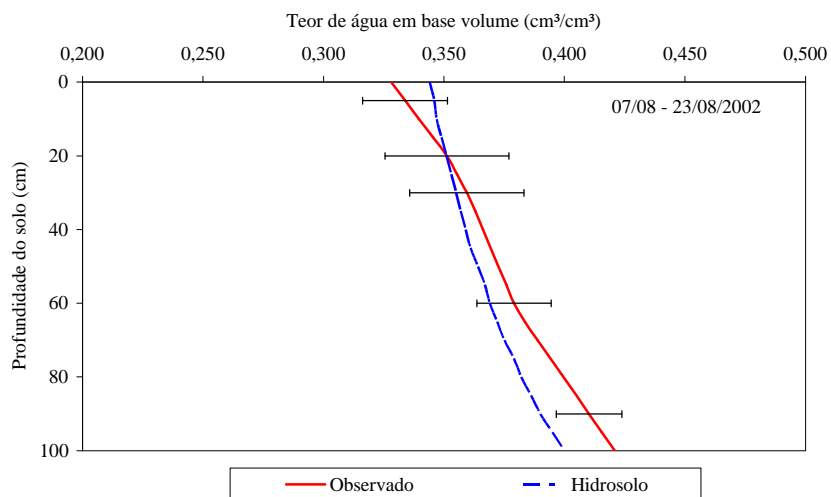
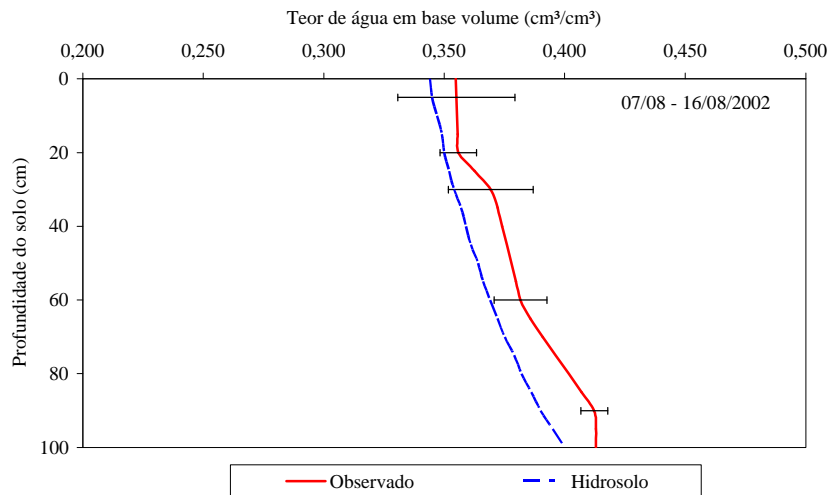
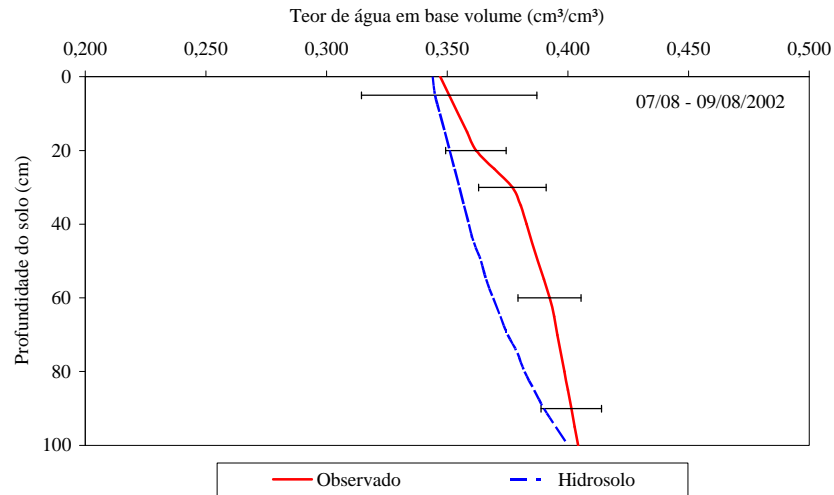


Figura 2.4.20- Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e com irrigação de 18 mm nos dias 9, 16 e 23/08/2002, a partir das condições iniciais 07/08/2002.

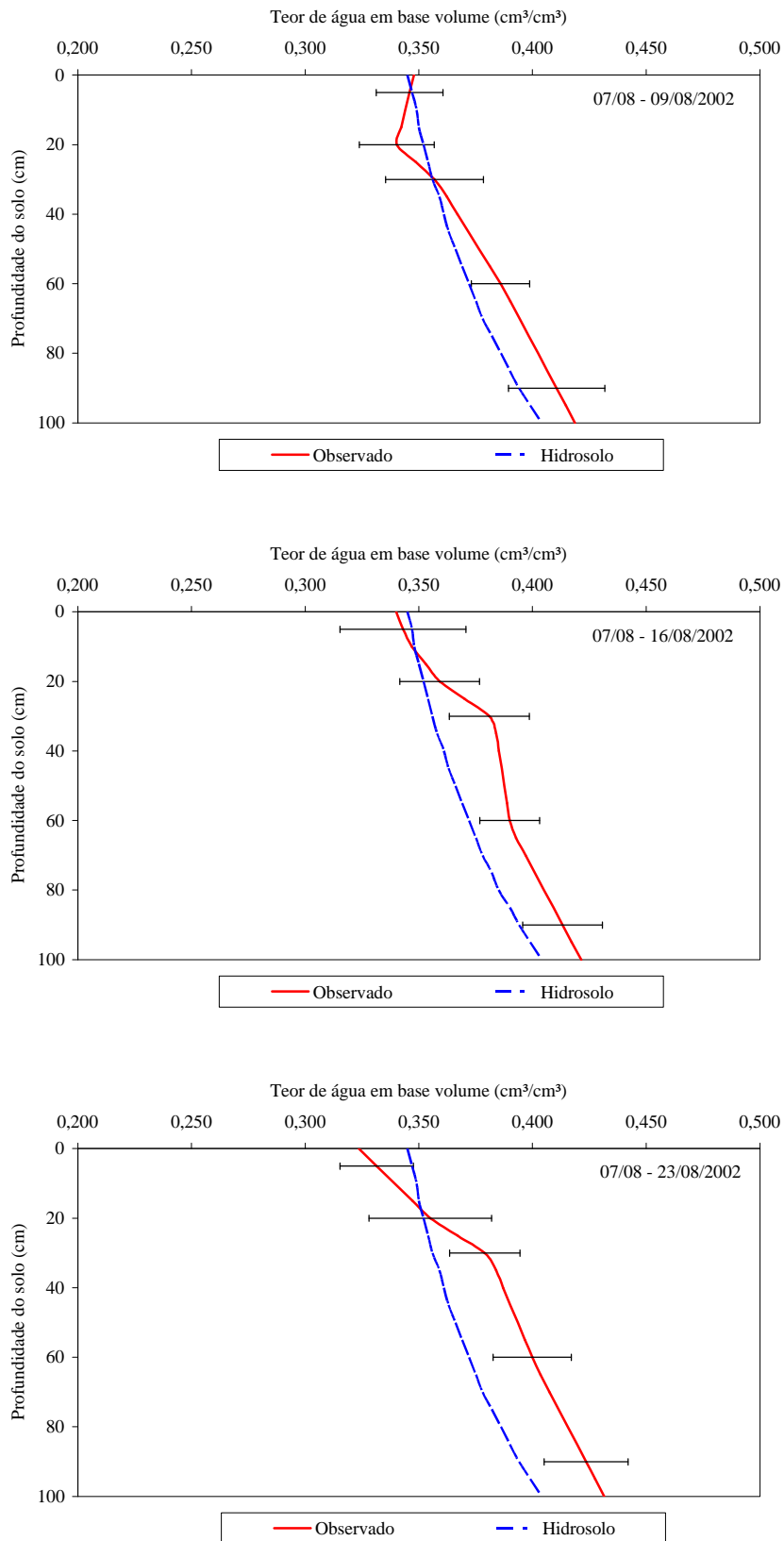


Figura 2.4.21- Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e com irrigação de 45 mm nos dias 9, 16 e 23/08/2002, a partir das condições iniciais 07/08/2002.

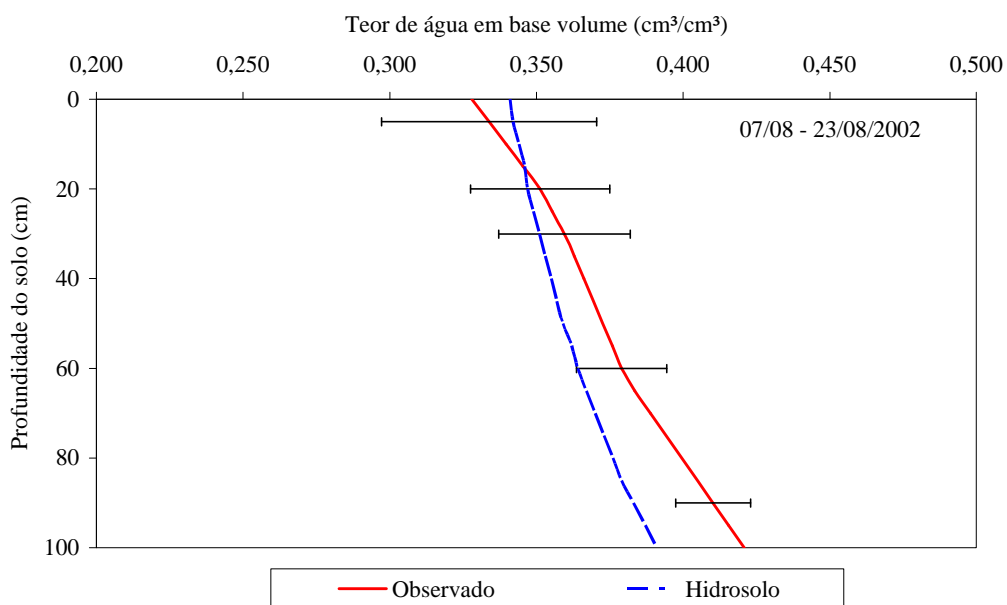
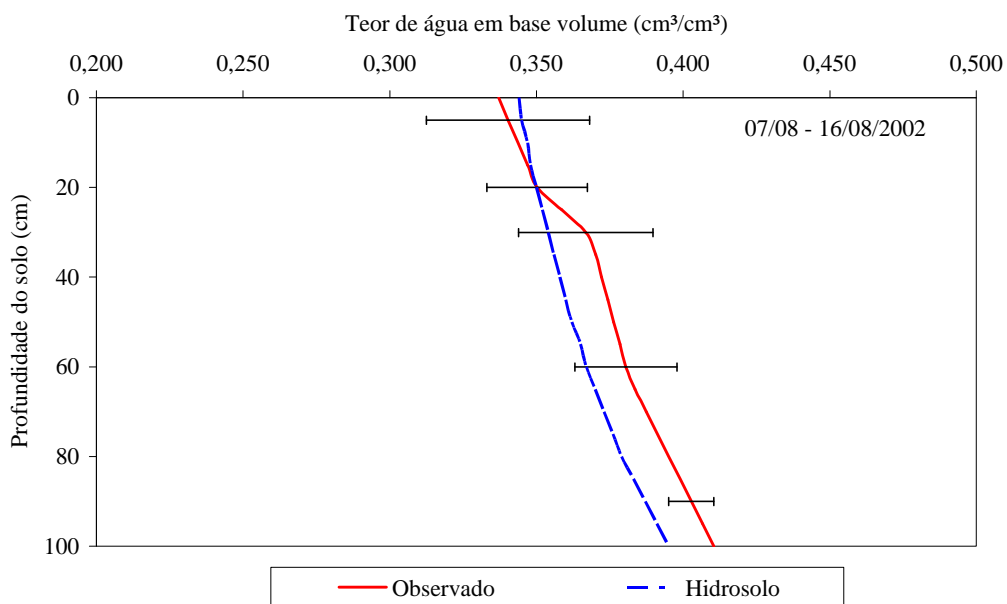


Figura 2.4.22 - Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e com irrigação de 18 mm nos dias 16 e 23/08/2002, a partir das condições iniciais 07/08/2002

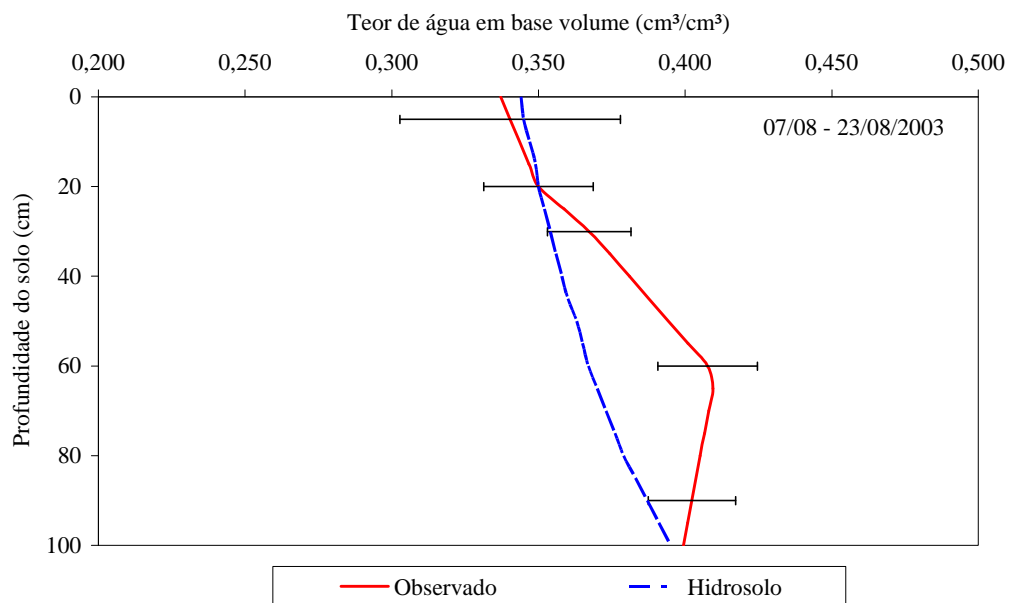
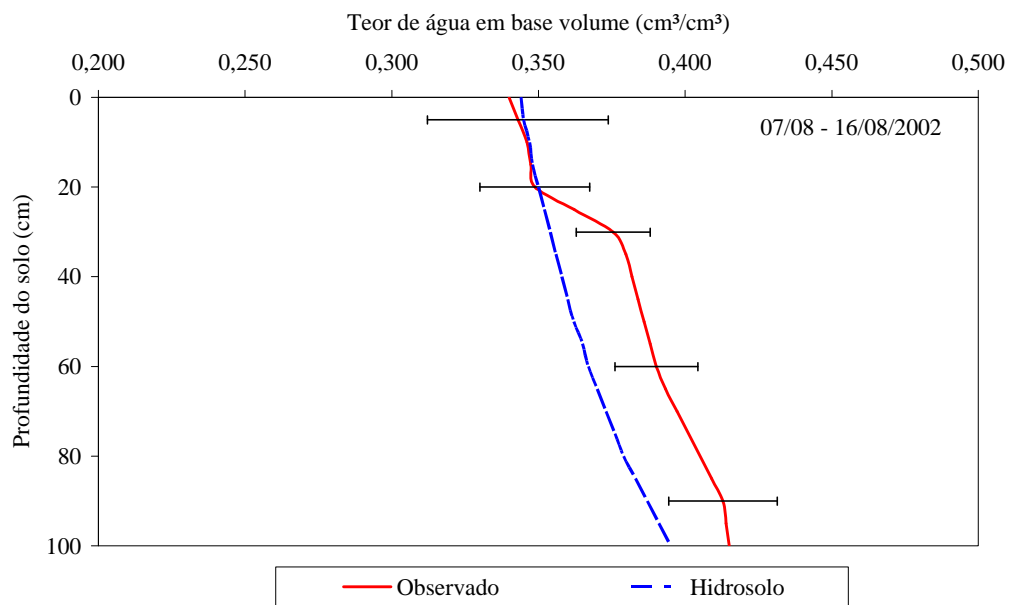


Figura 2.4.23 - Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e com irrigação de 45 mm nos dias 16 e 23/08/2002, a partir das condições iniciais 07/08/2002

2.4.4.2. Transporte do Carbofuran no perfil do solo

A exemplo do que foi feito para o movimento de água no perfil do solo, as simulações foram realizadas considerando a condição de contorno do tipo fluxo, tanto na superfície quanto na base da região de estudo.

Nas Figuras de 2.4.24 a 2.4.31 estão apresentados os perfis de concentração do Carbofuran, simulados e observados, para os quatro tratamentos experimentais, ao longo do ensaio de campo.

O desempenho do modelo para o transporte do Carbofuran no solo foi apresentado, semelhantemente ao movimento de água, com a inserção do intervalo de confiança nos pontos observados. A grande variação obtida nos valores observados da concentração dificultou uma análise mais detalhada do comportamento dos valores simulados.

Pelas Figuras 2.4.24 a 2.4.31, percebe-se uma grande variação entre os valores simulados e observados, principalmente na camada superior do solo. Isso se deve à dificuldade encontrada para considerar a quantidade do produto como valor da condição inicial do modelo, uma vez que se esperava uma total dissolução do mesmo já nas primeiras irrigações, fato não ocorrido. Aliado a esse fato, a formulação granulada do Carbofuran e a forma com que esse produto foi liberado com o tempo, contribuiu para as discrepâncias ocorridas nas camadas superiores.

Uma outra fonte de erro dessa variação pode ser creditada ao modelo da isoterma de sorção linear utilizada no HIDROSOLO, não compatível para descrever os processos de sorção do carbofuran ocorridos no solo analisado. Alternativas do modelo de isotermas podem ser dadas como opção a ser escolhida pelo usuário conforme o conhecimento do comportamento de um determinado produto no solo.

Nas Tabelas 2.4.8 e 2.4.9 estão apresentados os valores da raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os perfis de distribuição do Carbofuran, simulado e observado. Observa-se que todas as simulações com lâmina de 18 mm proporcionaram menores valores dos erros quando comparados com as de 45 mm. Analisando as Figuras 2.4.24 a 2.4.31, percebe-se que esse fato pode estar relacionado com a deficiência do modelo em estimar o transporte do produto à maiores profundidades. Isso ocorre com os valores simulados para ambas as lâminas, porém, é mais acentuado para a lâmina de 45 mm em que se esperava que a simulação proporcionasse um maior deslocamento do produto no perfil do solo como

apresentado pelos valores observados. A diferença da distribuição do Carbofuran no perfil do solo apresentado entre as lâminas de irrigação de 18 e 45 mm é atribuída à componente convectiva no movimento de soluto no solo, entretanto, o modelo não apresentou de forma tão evidente quanto ao apresentado pelos valores observados. O modelo HIDROSOLO não considerou as retiradas do Carbofuran do sistema analisado, provocadas pelo escoamento superficial. Isso contribuiu para o aumento dos valores do RMSE quando se compara os valores dos tratamentos com irrigação de 18 e 45 mm.

Tabela 2.4.8 – Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados para a distribuição do Carbofuran, no perfil do solo usando o modelo de Brooks-Corey, nas parcelas sem cultura

Início da simulação	Fim da simulação	RMSE (mg mL ⁻¹)	
		18 mm	45 mm
07/08/2002 - 9:00 h	09/08/2002 – 9:00 h	0,831	1,335
07/08/2002 - 9:00 h	16/08/2002 – 9:00 h	0,570	0,792
07/08/2002 - 9:00 h	23/08/2002 – 15:30 h	0,171	1,138
16/08/2002 - 9:00 h	11/09/2002 – 9:30 h	0,340	0,750
16/08/2002 - 9:00 h	16/10/2002 – 9:30 h	0,672	0,694

Tabela 2.4.9 – Raiz do quadrado do erro médio (RMSE) entre os valores observados e simulados para a distribuição do Carbofuran, no perfil do solo usando o modelo de Brooks-Corey, nas parcelas com cultura

Início da simulação	Fim da simulação	RMSE (mg mL ⁻¹)	
		18 mm	45 mm
07/08/2002 - 9:00 h	16/08/2002 – 9:00 h	0,605	1,143
07/08/2002 - 9:00 h	23/08/2002 – 15:30 h	0,220	1,033
16/08/2002 - 9:00 h	11/09/2002 – 9:30 h	0,211	0,336
16/08/2002 - 9:00 h	16/10/2002 – 9:30 h	0,052	0,067

De forma Geral, houve uma tendência da redução do erro para os quatro tratamentos, com o tempo. Fato que pode ser atribuído ao termo de degradação do produto. Porém, inúmeros fatores estão relacionados a esse processo, o que ainda requer muito estudo (SPARKS, 1989 e BEDIENT et al., 1999)

A introdução do processo de extração do pesticida pelo sistema radicular proporcionou grande melhoria nos resultados simulados a partir da terceira amostragem (23/08) para as simulações com aplicação da lâmina de 45 mm e da quarta amostragem (11/09) para a lâmina de 18 mm, ficando mais evidente na última amostragem quando comparado com as simulações sem cultura. Isso pode estar relacionado com o desenvolvimento da cultura, sendo que a partir da terceira amostragem o sistema radicular apresentou maior atividade não só na camada superficial, onde ocorreu as maiores variações nas simulações sem cultura, mas na profundidade do sistema radicular correspondente à cultura do feijoeiro para àquele estágio de desenvolvimento. O processo de extração de solutos pelo sistema radicular das culturas é considerado por muitos pesquisadores de difícil representação (WAGENET e RAO, 1990; REICHARDT, 1996; TINKER e NYE, 2000). Entretanto, a representação da extração de solutos utilizado pelo HIDROSOLO, pode ser revista fazendo com que o modelo possa simular a presença de um sistema radicular de forma mais dinâmica.

A equação do transporte de solutos em meios porosos é função do teor de água obtida pela resolução da equação de Richards. Com isso, os erros obtidos no balanço de água no solo pode propagar na solução da equação de transporte de solutos, tornando-se assim mais uma fonte de erro entre os dados estimados e os observados.

Deve ser salientado que os parâmetros da equação de transporte de solutos, como o coeficiente de partição (K_d), a dispersividade (δ) e o coeficiente de dispersão hidrodinâmico (D) foram obtidos em condição de solo saturado, sendo que as simulações procederam-se em solos não saturados.

De forma geral, o HIDROSOLO não apresentou o mesmo desempenho na predição do transporte do Carbofuran no perfil do solo do encontrado para a água. Porém, deve ser ressaltado que, devido à grande heterogeneidade do solo, quando se faz esse tipo de levantamento em campo o grau de complexidade na determinação dos parâmetros relacionados ao transporte de solutos é extremamente alto. Processos mais detalhados como sorção, as diversas formas de dissipação do composto no solo e a volatilização não foram empregados nesse modelo.

A heterogeneidade do solo e os diversos processos que definem o destino dos pesticidas no solo como a retenção, a transformação e redistribuição, são fatores difíceis de serem contemplados por modelos matemáticos devido a uma gama de

condicionantes impostas por fatores climáticos, propriedades físicas, químicas e biológicas do solo e física e químicas do pesticida. Como exemplo, pode-se citar a baixa atividade da argila do solo estudado. Dentre os componentes do solo estudado capazes de influenciar os processos de retenção do pesticida no solo, a matéria orgânica ocupou um papel mais importante que o da argila. Essa informação pode ser obtida na Tabela 2.3.2, em que apresenta um solo com baixos valores de CTC efetiva e médios valores de matéria orgânica. Segundo REGITANO (2000), de forma geral, a fração argila do solo ocupa papel secundário, mas ainda importante na sorção de pesticidas, principalmente quando o conteúdo da matéria orgânica é menor que 1%. Quando o conteúdo da matéria orgânica superar a 1%, ela revestirá grande parte das frações minerais do solo, principalmente os minerais de argila, tornando-se a fração mais exposta para que ocorra interações hidrofóbicas. Essa informação vem de encontro com os resultados obtidos nesse trabalho, em que parte do pesticida mostrou-se mais retido nas camadas superficiais do solo onde os valores de matéria orgânica são maiores.

De modo geral, os resultados obtidos pelo HIDROSOLO permitem fazer inferências quanto ao comportamento do Carbofuran no solo, principalmente, quando se refere à distribuição desse pesticida no perfil do solo com o tempo.

Outros trabalhos, com outros ingredientes ativos devem ser realizados para verificar melhor o desempenho do modelo HIDROSOLO na predição do comportamento de pesticidas no solo.

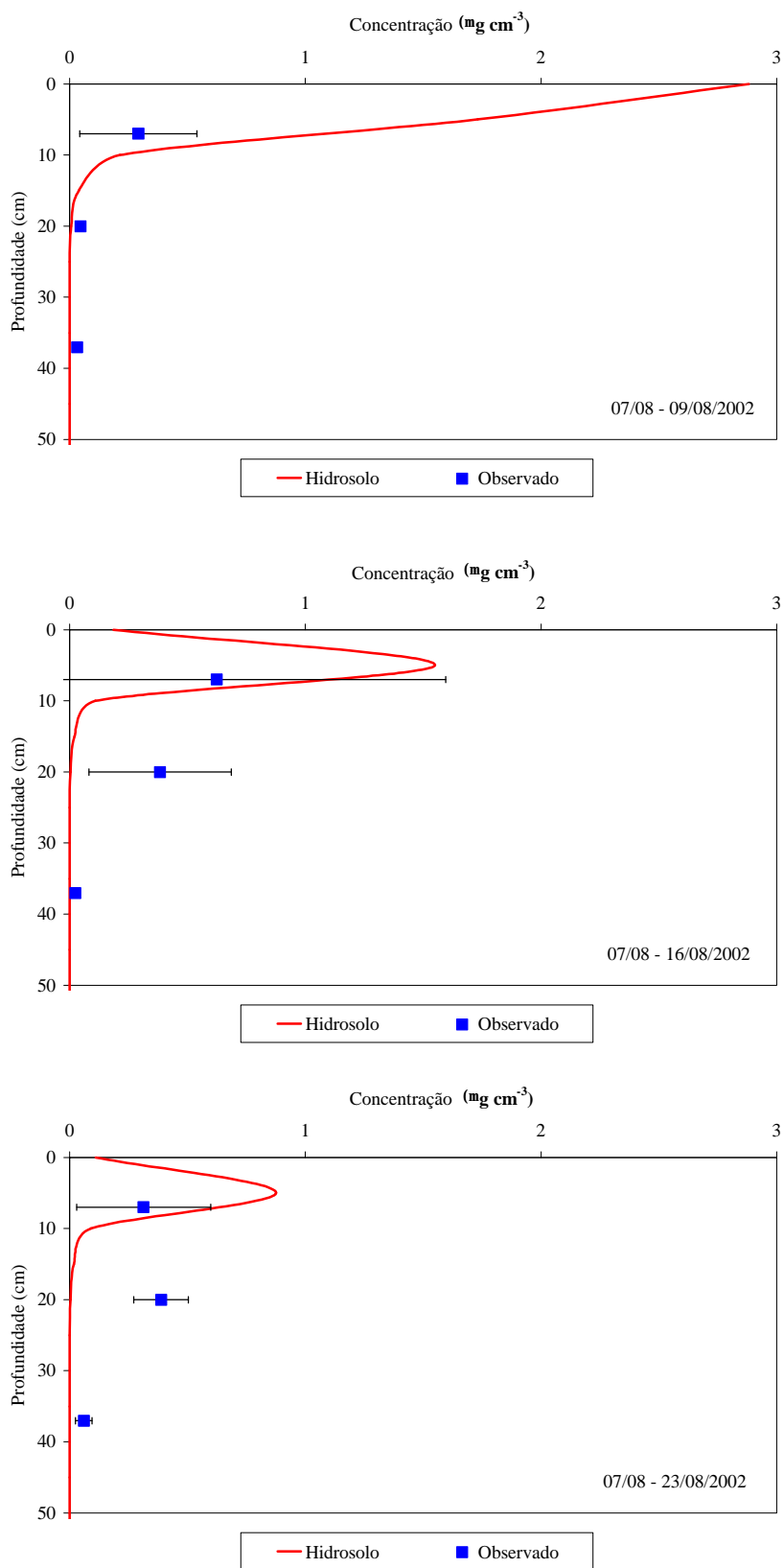


Figura 2.4.24 – Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e 18 mm de irrigação para os dias 9, 16 e 23/08/2002 a partir dos dados do dia 07/08/2002.

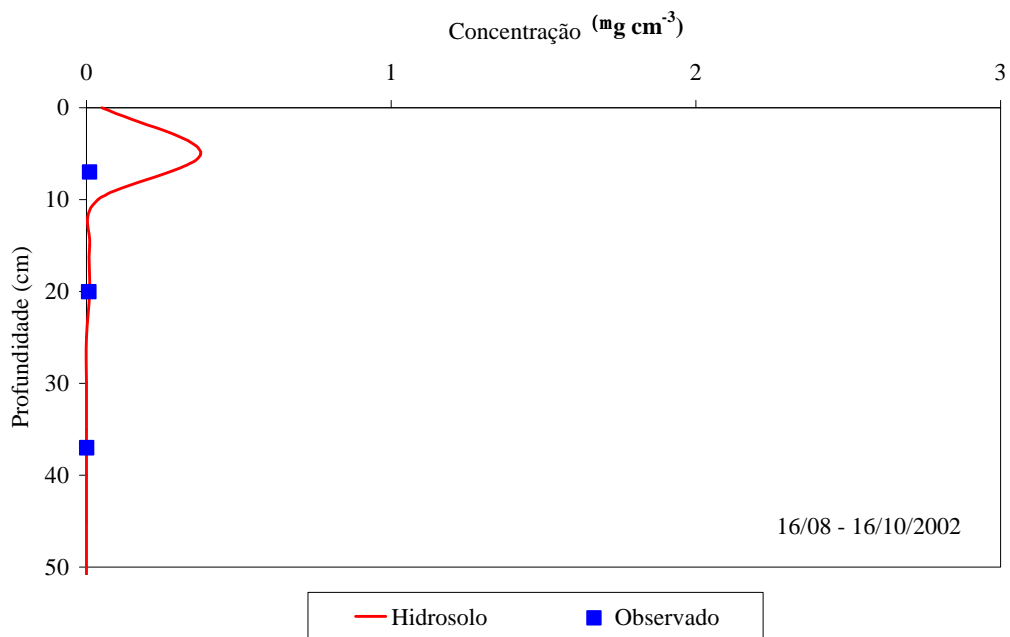
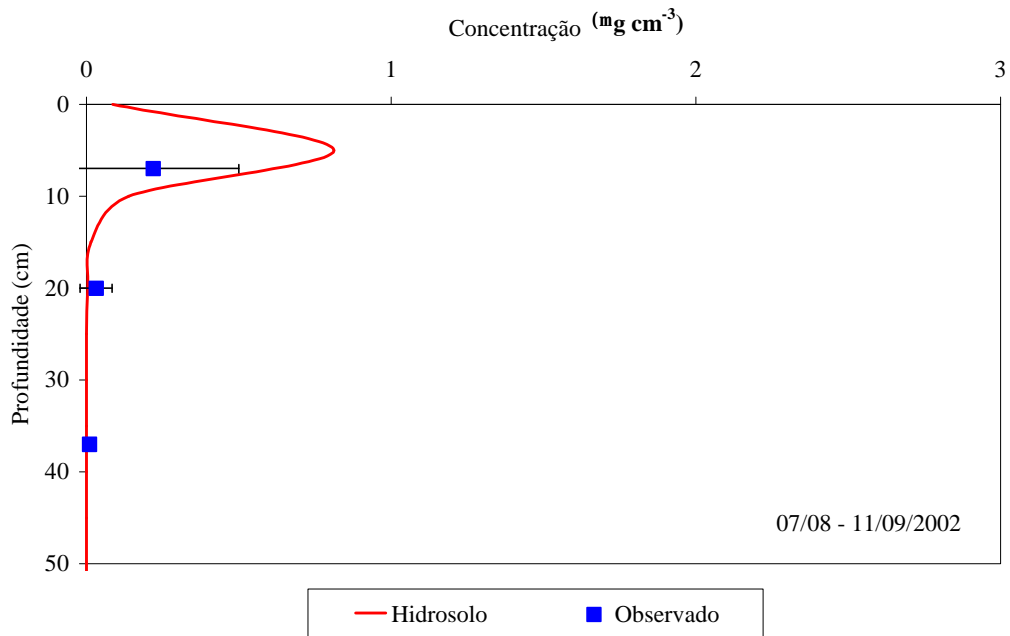


Figura 2.4.25 – Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e 18 mm de irrigação para os dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002.

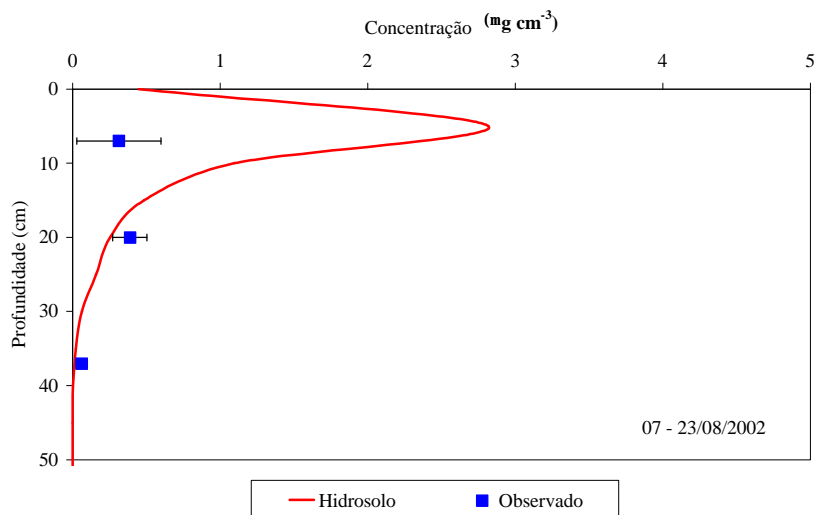
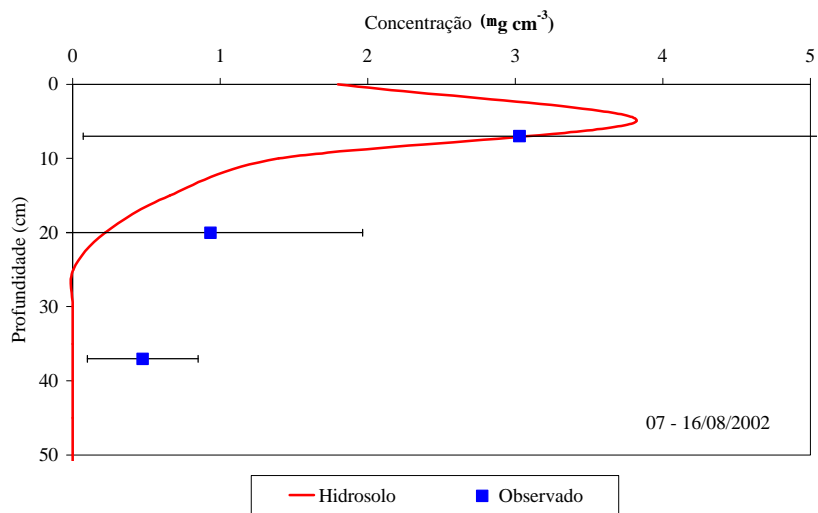
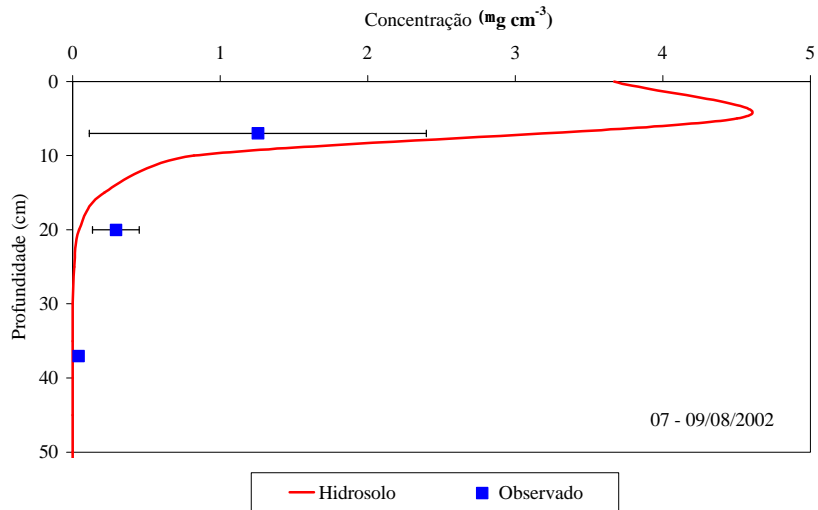


Figura 2.4.26 – Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e 45 mm de irrigação para os dias 9, 16 e 23/08/2002 a partir dos dados do dia 07/08/2002.

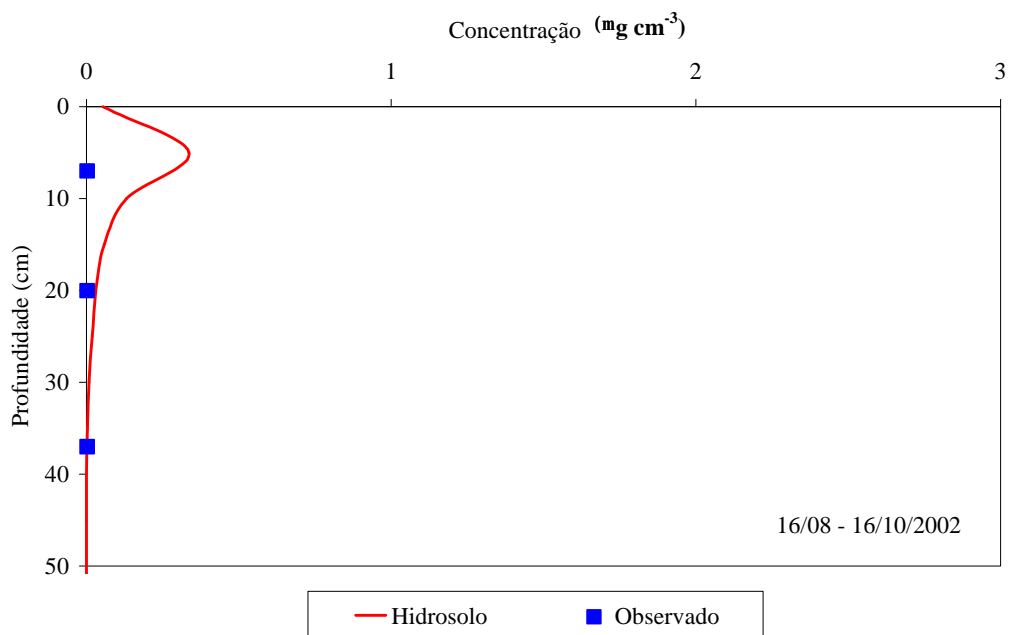
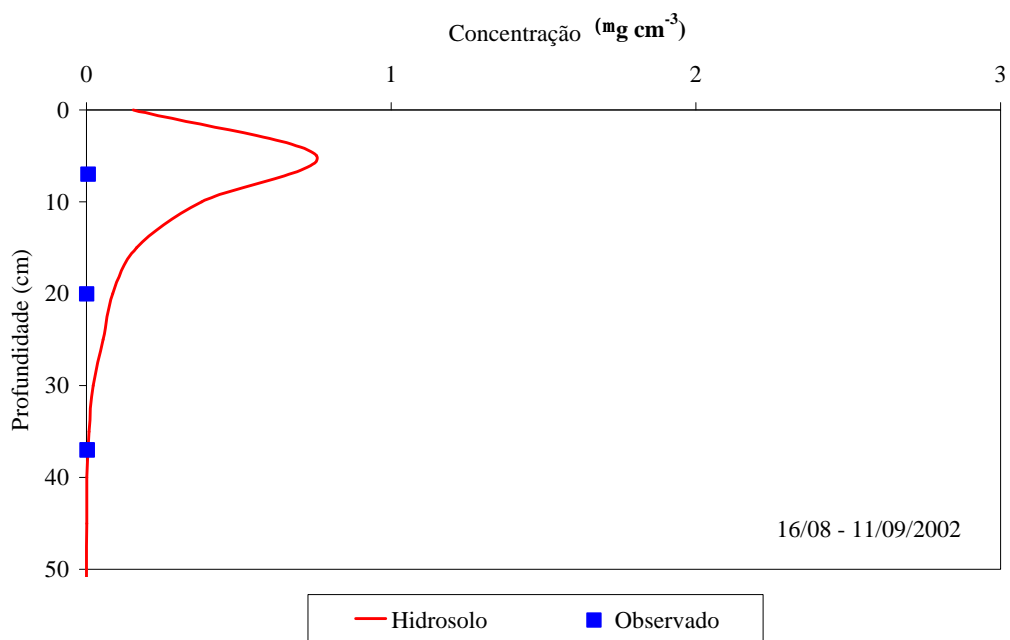


Figura 2.4.27 – Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e 45 mm de irrigação para os dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002.

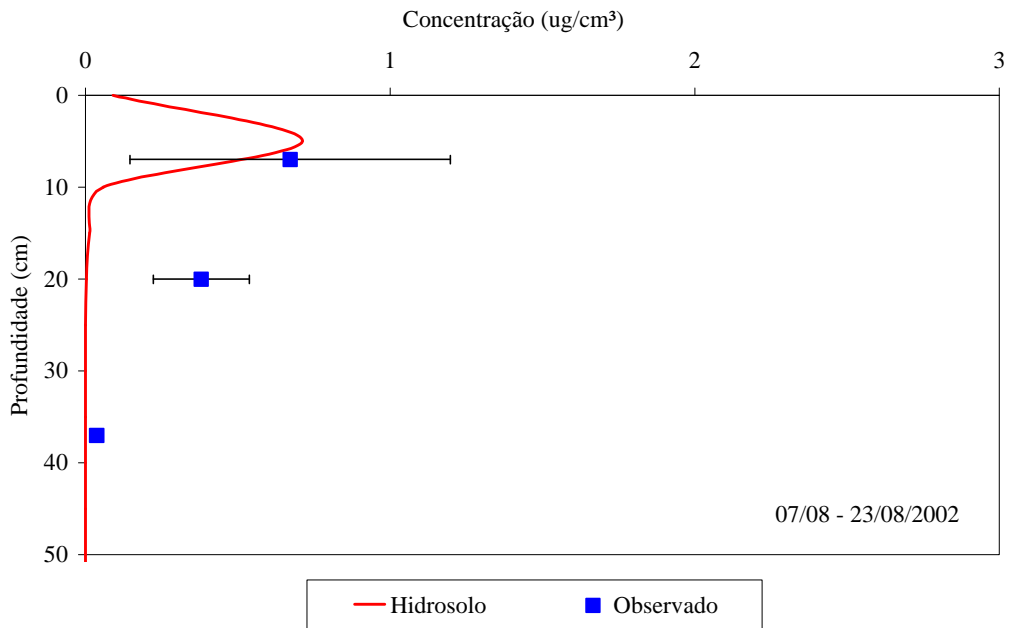
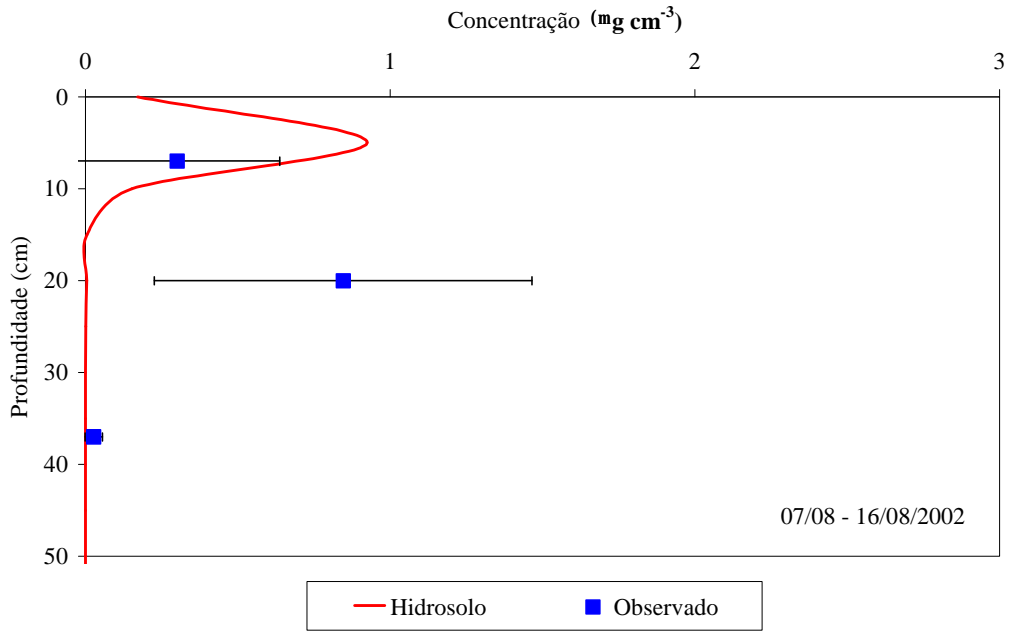


Figura 2.4.28 – Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e 18 mm de irrigação para os dias 16 e 23/08/2002 a partir dos dados do dia 07/08/2002.

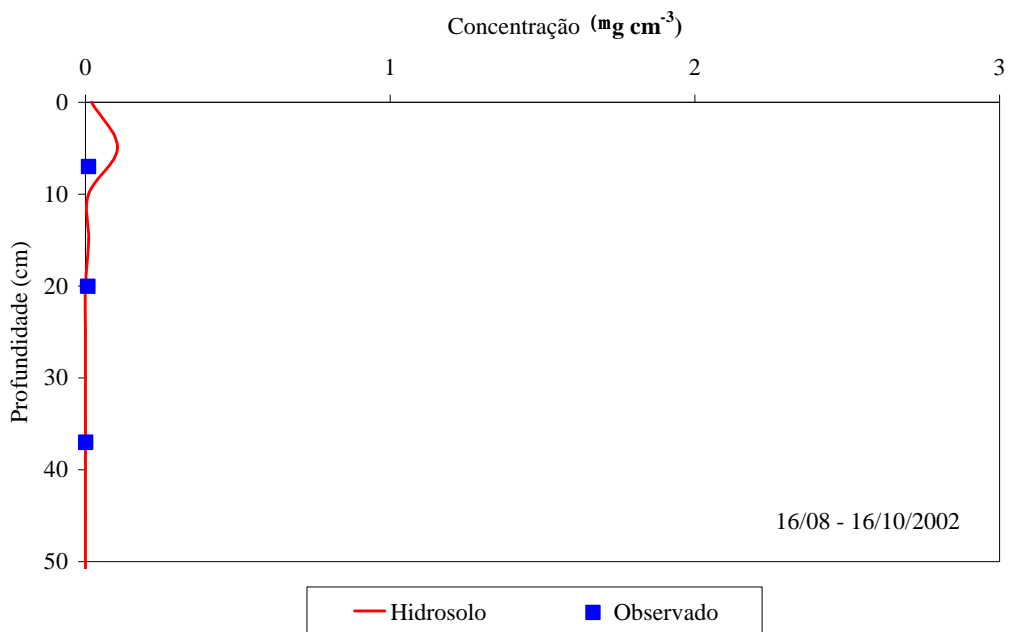
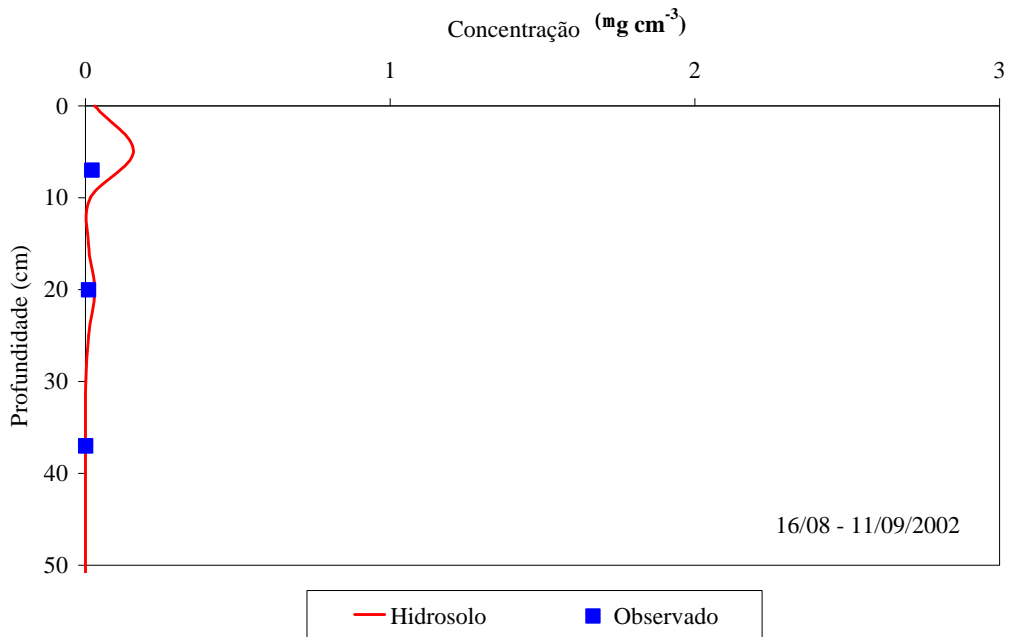


Figura 2.4.29 – Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e 18 mm de irrigação para os dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002.

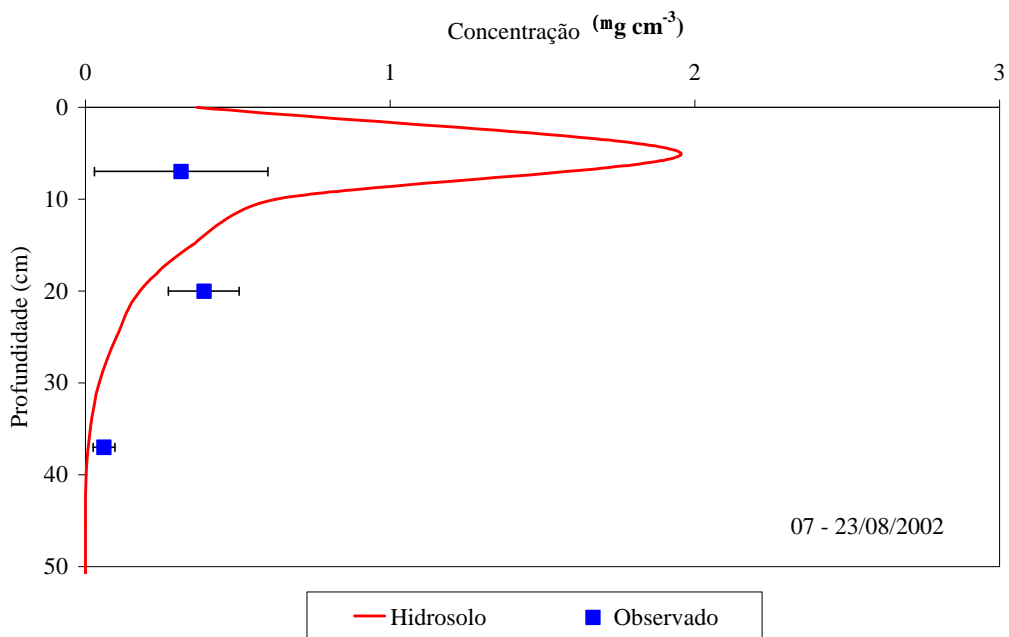
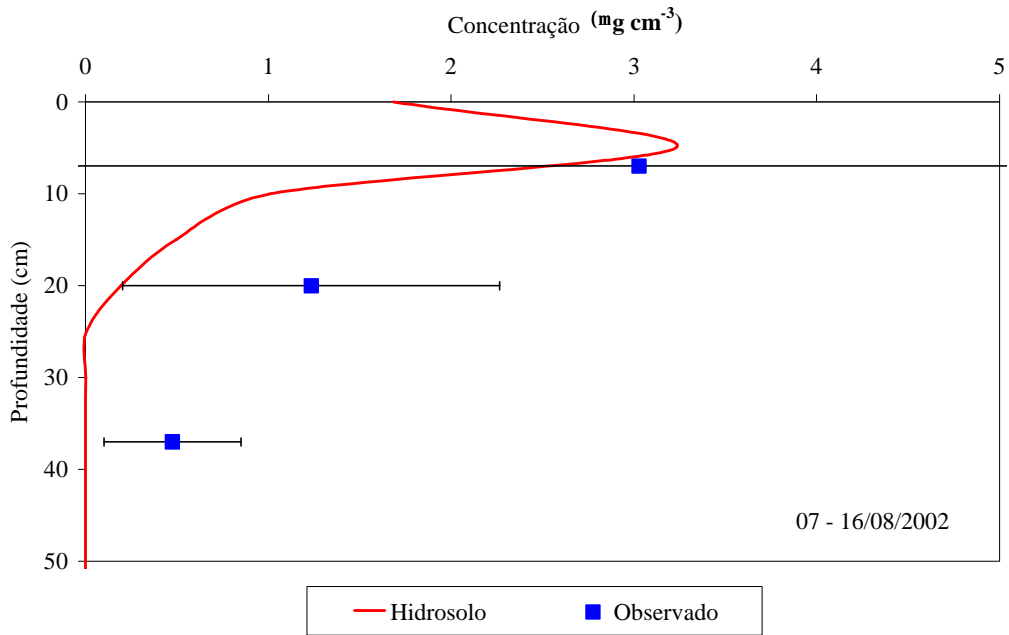


Figura 2.4.30 – Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e 45 mm de irrigação para os dias 16 e 23/08/2002 a partir dos dados do dia 07/08/2002.

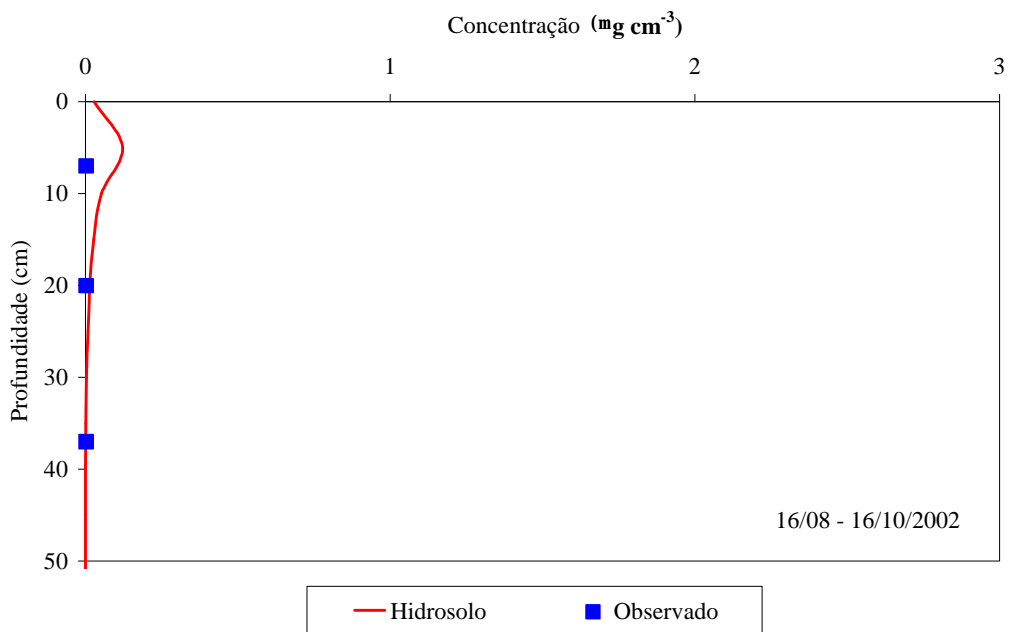
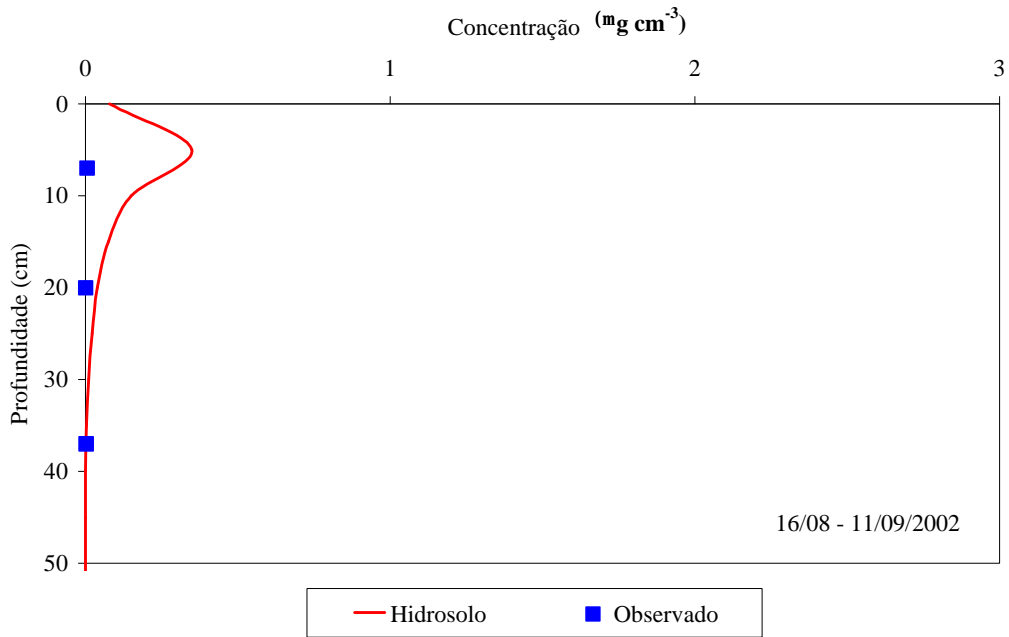


Figura 2.4.31 – Perfil de distribuição do Carbofuran no solo, observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e 45 mm de irrigação para os dias 11/09 e 216/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002.

2.5. RESUMO E CONCLUSÕES

Desenvolveu-se um modelo computacional para simular o transporte de água e solutos no solo, sob condições de escoamento não permanente e unidimensional, considerando a extração de água e solutos pelo sistema radicular da cultura e a taxa de degradação do pesticida. Esse modelo foi desenvolvido, utilizando a linguagem Delphi, com compilador Turbo Delphi 3.0 de domínio público. Foi utilizado a equação de Richards para obter a distribuição do potencial matricial em que a água é retida no solo e a equação de transporte dispersivo-convectivo para descrever o transporte de solutos no solo. Para resolução dessas equações foi utilizado o método de diferenças finitas.

O modelo, denominado HIDROSOLO, foi testado para a condição de solo não saturado, comparando-se os resultados obtidos de sua aplicação com àqueles obtidos experimentalmente, baseados em tratamentos com e sem cultura e com lâminas de irrigação de 18 e 45 mm, aplicadas em uma hora.

Os resultados obtidos na aplicação do programa permitiram as seguintes conclusões.

- De modo geral, o modelo HIDROSOLO simulou de forma satisfatória o movimento de água no solo.

- A representação do processo de extração de água pelo sistema radicular da cultura, utilizado pelo HIDROSOLO, proporcionou melhores resultados quando comparado com os valores simulados sem a presença da mesma.
- Apesar dos bons resultados obtidos na predição do movimento de água no solo, ajustes devem ser feitos com relação a descrição do processo de evaporação de água na camada superficial.
- o modelo HIDROSOLO não estimou de forma adequada a distribuição da concentração de Carbofuran nas camadas superficiais do solo analisado.
- A utilização do processo de extração do pesticida pelo sistema radicular da cultura proporcionou melhores resultados, principalmente quando o modelo considerou a cultura em estágio de desenvolvimento mais avançado.
- O modelo HIDROSOLO apresentou flexibilidade na escolha de diferentes cenários, mostrando ser uma ferramenta útil em estudos estratégicos de manejo e prevenção de contaminação ambiental.

2.6. RECOMENDAÇÕES FINAIS

O modelo HIDROSOLO representa mais um passo na linha de pesquisa voltada para problemas de poluição do solo e de águas subterrâneas. Entretanto, ajustes se fazem necessários para o melhor desempenho do mesmo. Com isso o autor recomenda:

- Incluir o cálculo do índice de potencial de risco da contaminação de águas superficiais.
- Avaliar o modelo para condições diferentes das testadas neste trabalho.
- Incluir o processo transporte de solutos pelo escoamento superficial.
- Reavaliar o processo de evaporação da camada superficial.
- Incluir no modelo, processo que descrevam melhor a dissipação do pesticida no solo.
- Reavaliar as equações matemáticas que representam a extração de água e solutos no solo.

2.7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ADIKU, S. G. K.; BRADDOCK, R. D.; ROSE, C. W. Simulating root growth dynamics. *Environmental Software*, **Great Britain**, v.11, n.1-3, p. 99-103, 1996.

ALEXANDER, L.; SKAGSS, R.W. Predicting unsaturated hydraulic conductivity from the soil water characteristic. **Transaction of ASAE**, St Joseph, v.29, n.1, p.176-184, Jan./Feb. 1986.

ANDERSON, M. P. **Movement of contaminants in groundwater: groundwater transport – Advection and dispersion**. In: USSELMAN, T. M. *Groundwater Contamination*. Washington, D. C.: National Academy Press, 1984, p.37-45.

BA A AO LU, H., GINN, T. R.; McCOY, B. J. Formulation of soil-pesticide transport model based on compartmental approach. **J. Contaminant Hydrology**. v. 56, p.1-24, 2002.

BASKARAN, S.; KENNEDY, I. R. Sorption and desorption kinetics of diuron, fluometuron, prometryn and pyriithiobac sodium in soils. **J. Environmental Science Health**. B34(6), p. 943-963, 1999.

BEAR, J. **Hydraulics of Groundwater** . McGraw-Hill Inc. New York , 1979, 569p.

BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media** . Dover Publications Inc. New York, 1988, 764p.

BEDIENT, P.B.; RIFAI, H.S.; NEWELL, C.J. **Ground water contamination-transport and remediation**. 2 ed. Prentice-Hall. 1999, 604p.

BEESE, F; WIERENGA, P. J. Solute transport through soil with adsorption and root water uptake computed with a transient and a constant-flux model. **Soil Science**, Baltimore, v. 129, n.4, p. 245-252, apr. 1980.

BEHRENDT, H. ; BRUGGERMANN, R. MORGENSTEM, M. Numerical and analytical model of pesticide root uptake model comparison and sensitivities. **Chemosphere**. V.30,n.10,p.1905-1920. 1995.

BERNARDO, S. **Manual de irrigação**. 6.ed. Viçosa, MG: Universidade Federal de Viçosa, 1996. 657p.

BIGGAR, J. W.; NIELSEN, D. R. Spatial variability of the leaching characteristics of a field soil. **Water Resources Researches**. v.12, p.78-84, 1976.

BORG, H.; GRIMES, D.W. Depth development of roots with time: an empirical description. **Transaction of ASAE**, St. Joseph, v.29, n.1, p.194-197, Jan. 1986.

BORGES JUNIOR, J. C. F.; FERREIRA, P. A. Programa DISP. Universidade Federal de Viçosa

BROOKS, R. H.; COREY, A. T. **Hydraulic properties of porous media**. (Hydrology paper, 3). Colorado State University, 1964.

CARDON, G.E.; LETEY, J. Plant water uptake terms evaluated for soil water and solute movement models. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.32, n.5, p.1876-1880, Sep./Oct. 1992.

CARSEL, R. F.; MULLINS, J. A.; SCARBROUGH, J. E.; IVERY, A. M. **PRZM – A model for predicting pesticide fate in the crop root unsaturated soil zones: User's manual for release 2.0**. Athens. 275 p., 1993.

CHENG, H.H. Pesticides in the soil environment-an overview. In: CHENG, H. H. **Pesticides in the soil environment: Processes, impacts and modeling**. Madison: Soil Science Society of America. 1990. p.1-5.

CLEMENTE, R. S.; PRASHER, S. O.; BARRINGTON, S. F. PESTFADE, A new pesticide fate and transport model: model development and verification. **Transaction of ASAE**. St. Joseph. V.36, p. 357-367, 1993.

COELHO E. F.; OR, D. Modelo de distribuição de água e de potencial matricial no solo sob gotejamento com extração de água por raízes. **Pesq. Agropec. Bras.**, Brasília, v.34, n.2, p.225-234, fev. 1999

CORRÊA, M. M. **Desenvolvimento e teste de modelo de transporte unidimensional de solutos no solo**. 2001. 104p. Tese (Doutorado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Viçosa.

DOU, Z.; FOX, R.H. Using NCSWAP to simulate seasonal nitrogen dynamics in soil and corn. **Plant and Soil**, Netherlands, v.177, p.235-247, 1995.

DUST, M.; BARAN, N.; ERRERA, G.; HUTSON, J. L.; MOUVET, C.; SCHÄFER, H.; VEREEKEN, H. J.; WALKER, A. Simulation of water and solute transport in field soils with the LEACHP model. **Agricultural Water Management**. V.44, p. 225-245, 2000.

ENFIELD, C.G.; YATES, S.R. Organic chemical transport to groundwater. In: CHENG, H.H. **Pesticide in the soil environment: processes, impacts, and modeling**. Madison: Soil Science Society of America, 1990. p.271-302.

ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. EPA. Basic concepts of contaminant sorption at hazardous waste sites. **Ground water issue**. Ada: Superfund Technology Support Center For Ground Water. 7p.,1980.

FARIA, R.T. de; MADRAMOOTOO, C.A. Simulation of soil moisture profiles for wheat in Brazil. **Agricultural Water Management**, v.31, n.1, p.35-49. 1996.

FERERES, E.; GOLDFIEN, R.E.; PRUIT, W.O. The irrigation management program: a new approach to computer assisted irrigation scheduling. In: **Proceedings...**, Irrigation Scheduling for Water and Energy Conservation, St. Joseph: ASAE, 1981. p.202-207.

FERREIRA, P. A. **Manejo de água planta em solos salinos**. Apostila de notas de aula da disciplina Manejo de água-planta em solos salinos, 1999. 109 p.

FONTES, M.P.F. **Caracterização da carga elétrica superficial de partículas do solo**. In: Congresso Latino Americano de Ciência do solo, XIII, Águas de Lindóia, 1996.

FRANCE, J.; THORNLEY, J.H.M. **Mathematical models in agriculture: a quantitative approach to problems in agriculture and related sciences**. Butterworths, London, 1984, 335p.

FREEZE, R. A. CHERRY. **Groundwater**. Prentice-Hall. 1979. 604p.

FREIJER, J. I.; VELING, E. J. M., HASSANIZADEH, S. M. Analytical solutions of the convection-dispersion equation applied to transport of pesticides in soil columns. **Environmental Modeling and Software**. V.13, p. 139-149, 1998.

GERALD, C.F.; WHEATLEY, P.O. **Applied numerical analysis**. 3.ed. Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Company, 1984. 579p.

GOUDRIAAN, J.; van LAAR, H. H. **Modelling potential crop growth processes, textbook with exercises**. Wageningen: Kluwer academic publishers, 1994. 238p.

GREEN, R. E.; KARICKHOFF, S. W. Sorption estimates for modeling. In: CHENG, H. H. **Pesticides in the soil environment: processes, impacts and modeling**. Madison: Soil Science Society of America. 1990. p.79-101.

GRISAK, G. E.; PICKENS, J. F. Solute transport through fractured media: 1 The effect of matrix diffusion. **Water Resources Researches**. V.16, 1981, p.731-739

HAMMING, R.W. **Numerical methods for scientists and engineers**. 2. ed. Dover Publications Inc. New York, 1988, 721p.

HILLEL, D. **Fundamentals of soil physics**. New York: Academic Press. 1980, 413p.

HIMEL, C. M.; LOATS, H.; BAILEY, G. W. Pesticide sources to the soil and principles of spray physics. In: CHENG, H. H. **Pesticides in the soil environment: processes, impacts and modeling**. Madison: Soil Science Society of America. 1990. p.7-50.

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.

JARVIS, N. J.; BROWN, C. D.; GRANITZA, E. Sources of error in model predictions of pesticide leaching: a case study using the MACRO model. **Agricultural Water Management**. v.44, p. 247-262, 2000.

JENSEN, M.E.; BURMAN, R.D.; ALLEN R.G. **Evapotranspiration and irrigation water requirements**. New York: America Society of Civil Engineers, 1990. 332p.

JURY, W. A.; GARDNER, W. **Soil physics**. New York: John Wile & Sons. 1991. 328p.

JURY, W.A.; GARDNER, W.R.; GARDNER, H.G. **Soil physics**, 15 ed., New York: Jonh Wiley and Sons Inc., 1991. 328p.

JURY, W. A.; SPENCER, W. F.; FARMER, W. J. Behavior assessment model for trace organics in soil: I Model description. **J. Environ. Qualit.** V.12, n.4, 1983, p.558-564.

KIRDA, C.; NIELSEN, D.R.; BIGGAR, J.W. simultaneous transport of chloride and water during infiltration. **Soil Science Society of American Proceeding**, v.37, p.339-345, 1973.

LEONARD, R. A. Moviment of pesticides into surface waters. In: CHENG, H.H. **Pesticide in the soil environment: processes, impacts, and modeling**. Madison: Soil Science Society of America, 1990. p.303-350.

LEONARD, R. A., KNISEL, W. G., STILL, D. A. GLEAMS: Groundwater loading effects of agricultural management systems. **Transaction of ASAE**. St. Joseph. V.30, p. 1403-1418, 1987.

LIBARDI, P.L. **Dinâmica da água no solo**. 1 ed., Piracicaba, SP: O autor, 1995. 497p.

LIWANG, M.; SCOTT, H.D.; SHAFFER, M.J.; AHUJA, L.R. RZWQM simulations of water and nitrate moviment in a manured tall fescue field. **Soil Science**, v.163, n.4, p.259-270, Apr. 1998.

LOAGUE, K.; YOST, R. S.; GREEN, R. E.; LIANG, T. C. Uncertainty in a pesticide leaching assessment for Hawaii. **Journal of Contaminant Hydrology**. N.4, p. 139-161, 1989.

MANOEL FILHO, J. **Contaminação das águas subterrâneas**. In: FEITOSA, F. A. C.; MANOEL FILHO, J. Hidrogeologia – conceitos e aplicações. Fortaleza: CPRM, 1997, 412p.

MARTINEZ, M.A. **Modeling subsurface drainage in echniqu silt loam using finite element echnique**. West Lafayette: Purdue University. 1989. 173p. (Thesis – Doctor of Philosophy in the Agricultural Engineering).

MUALEM, Y. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. **Water resources research**, Washington, DC, v. 12, n.3, p.513-522, 1976.

NATIONAL RESEARCH COUNCIL. **Ground water vulnerability assessment: Contamination potential under conditions of uncertainty**. Washington, National Academy Press. 1993. 204p.

OLIVEIRA, L. F. C. **Modelo para transporte de solutos no solo e no escoamento superficial**. 1999. 171p. Tese (Doutorado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Viçosa.

PARLANGE, J.Y.; STARR, J.L.; van GENUCHTEN, M.Th.; BARRY, D.A.; PARKER, J.C. Exit Condition for miscible displacement experiments. **Soil Science**, v.153, n.3, p.165-171, Mar. 1992.

PEREIRA, A. R.; VILLA NOVA, N. A.; SEDIYAMA, G. C. **Evapo(transpi)ração**. Piracicaba: FEALQ, 1997. 183p.

PETIT, V.; CABRIDENC, R. Review of strategies for modeling the environmental fate of pesticides discharged into riverine systems. **Environment International**. V.21, n.2, p. 167-176, 1995.

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

REGITANO, J.B.; ALLEONI, L.R.F.; VIDAL-TORRADO, P.; CASAGRANDE, J.C.; TORNISIELO, V. L. Imazaquin sorption in highly weathered tropical soils. **Journal of Environmental Quality**, v.29, p.894-900, 2000.

REICHARDT, K. **Dinâmica da matéria e da energia em ecossistemas**. 2.ed. Piracicaba: ESALQ. 1996, 513p.

ROGERS, J.S. Capacitance and initial time step effects on numerical solutions of Richards equation. **Transaction of ASAE**, St. Joseph, v.37, n.3, p.807-813, May/Jun. 1994.

SELIM, H.M.; ISKANDAR, I.K. Modeling nitrogen transport and transformations in soil: 1. Theoretical considerations. **Soil Science**, Baltimore, v.131, n.4, p.233-241, Apr. 1981.

SHEARER, R.C.; LETEY, J.; FARMER, W.J.; KLUTE, A. Lindane diffusion in soil. **Soil Science Society of American Proceedings**, v.37, p.189-193, 1984.

SPARKS, D. L. **Kinetics of soil chemical processes**. London, Academic Press, 1989. 210 p.

SMITH, M. C.; BOTTCHEER, A. B., CAMPBELL, M. Measurement of pesticide transport to shallow groundwater. **Transaction of ASAE**. St. Joseph. v.33, n.5, p. 1573-1581, 1988.

SULEKHA, B.; KASHYAP, D; DUIJNISVELD, W. H. M. Two-phase-reactive solute-transport simulation in unsaturated zone. **Journal of irrigation and drainage engineering**. v.143 n.3, p. 140-147, 1998.

SUN, NE-ZHENG. **Mathematical Modeling of Groundwater Pollution**. New York: Springer-Verlag. 1995. 376p.

TIMM, L. C.; MARTINEZ, M. A.; FERREIRA, P. A.; MARTINS, J. H. Avaliação de alguns modelos matemáticos para a determinação da condutividade hidráulica de solos não saturados. **Revista Engenharia na Agricultura**, Viçosa, MG, v.4, n.44, p.1-19,1995.

TINKER, P. B.; NYE, P. H. **Solute movement in the rhizosphere**. New York, Oxford University Press. 2000. 444p.

TOMLIN, C.A. **World Compendium, The Pesticide Manual Incorporating the Agrochemical Handbook**. 3rd ed. Crop Protection Publications, 659p. 1995.

van DAM, J. C.; FEEDES, R. A. Numerical simulation of infiltration, evaporation and shallow groundwater levels with the Richards equation. **Journal of Hydrology**, n.233, p.72-85, 2000.

Van GENUCHTEN, M. Th., A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.44, p.892-898, 1980.

van GENUCHTEN, M. Th.; LEIJ, F. J.; YATES, S. R. **The RETC code for quantifying the hydraulic functions of unsaturated soils**. Environmental Protection Agency, Oklahoma. 1991. 85p.

van GENUCHTEN, M.Th.; PARKER, J.C. Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns. Madison: **Soil Science Society of American Journal**, v.48, p.703-708, 1984.

van GENUCHTEN, M. Th.; WIERENGA, P. J. Solute dispersion coefficients and retardation factors. In: KLUTE, A. (Ed.). **Methods of soil analysis. I – Physical and mineralogical methods**. Madison: Soil Sci. Soc. Am., 1986. p.1025-1054.

VANCLOOSTER, B.; BOESTEN, J. J. T. I.; TREVISAN, M.; BROWN, C. D.; CAPRI, E.; EKLO, O. M.; GOTTESBÜREN, B.; GOUY, V.; van der LINDEN, A. M. A. A European test of pesticide-leaching models: methodology and major recommendations. **Agricultural Water Management**. V.44, p. 1-19, 2000.

VANCLOOSTER, M.; VIAENE, P.; DIELS, J.; CHRISTIAENS, K. **Wave, a mathematical model for simulating water and agrochemicals in the soil and vadose environment**. Leuven: Institute for Land and Water Management, 1994. 145p.

VIEIRA; E. de O.; RAMOS, M. M.; CRUZ, I.; PRATES, H. T.; MARTINEZ, M. A. Movimentação de inseticidas de tratamento de sementes no solo sob efeito de irrigação. **Engenharia na Agricultura**. Viçosa, MG. v.8, n.3, p. 141-157. jul./set., 2000.

VOGEL, T.; HUANG, K.; ZHANG, R.; van GENUCHTEN, M.Th. **The HYDRUS code for simulating one-dimensional water flow, solute transporte, and heat movement in variably-saturated media**. Riverside: U.S. Salinity Laboratory, 1996. 131p. (Research Report, 140).

WAGENET, R. J., RAO, P. S. C. Modeling pesticide fate in soils, In: CHENG, H. H. **Pesticides in the soil environment: Processes, impacts and modeling**. Madison: Soil Science Society of America. 1990. p.351-99.

WAGENET, R. J.; RAO, P. S. C. Basic concepts of modeling pesticide fate in the crop root zone. **Weed Science**, v. 33, (supplement 2), p. 25-32, 1985.

WAGENET, R. J., RAO, P. S. C. Modeling pesticide fate in soils, In: CHENG, H. H. **Pesticides in the soil environment: Processes, impacts and modeling**. Madison: Soil Science Society of America. 1990. p.351-399.

WATER SCIENCE AND TECHNOLOGY BOARD. **Ground water models: Scientific and regulatory applications**. Washington, National Academy Press. 1990. 303 p

APÊNDICES

APÊNDICE 1

Tabela 1A – Características de operação do dispositivo de aplicação de água para o melhor desempenho obtido em testes de campo

Pressão serviço kPa	Vazão dos bocais L h ⁻¹		Intensidade aplicação mm h ⁻¹	Altura do solo m	CUC %	CUD %
	Azul	Verde				
120	39,6	55,2	43,51	0,7	90,2	80,0

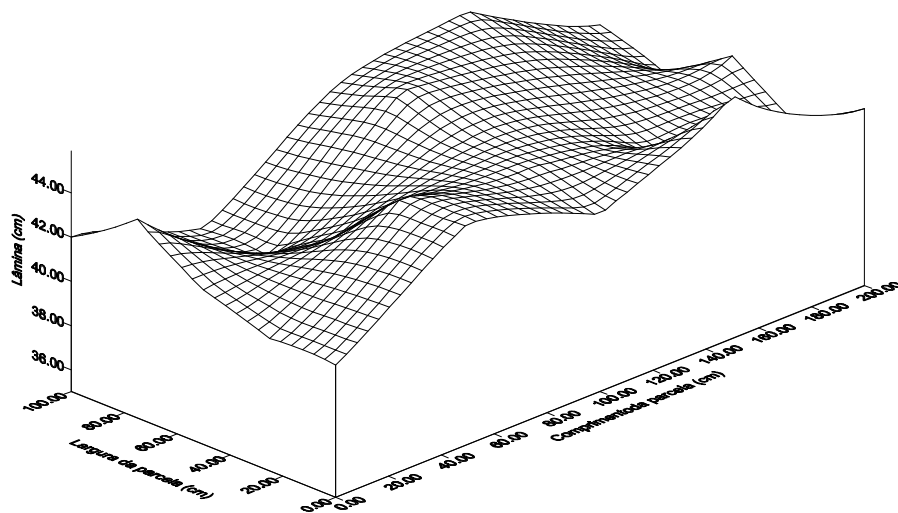


Figura 1A – Perfil de distribuição de água dentro da parcela experimental.

APÊNDICE 2

Tabela 2A– Características de operação do aspersor NAAN 5024 para as condições do experimento

Pressão serviço	Vazão dos bocais	Intensidade aplicação (média)	CUC	CUD
kPa	m ³ h ⁻¹	mm h ⁻¹	%	%
300	0,816	18,5	90,15	85,20

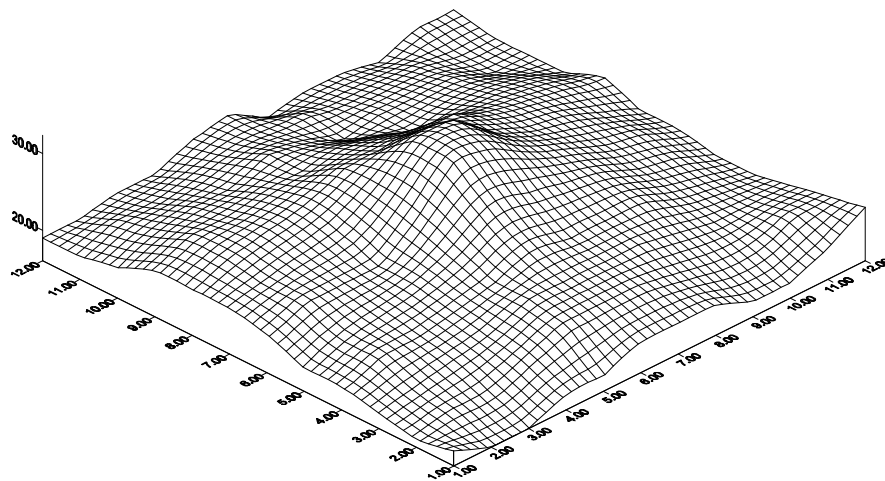


Figura 2A– Perfil de distribuição de água para o aspersor NAAN na área experimental.

APÊNDICE 3

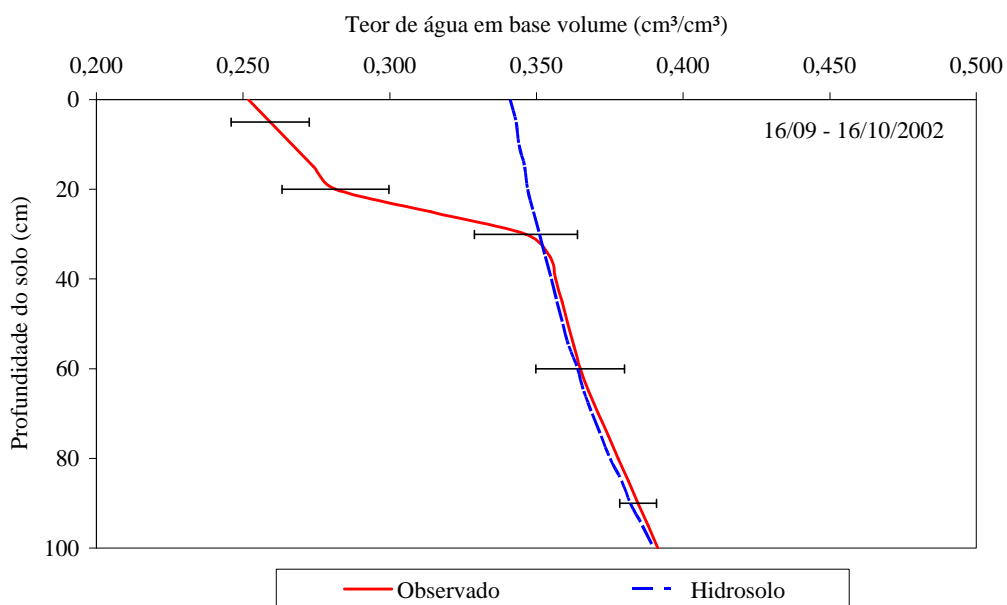
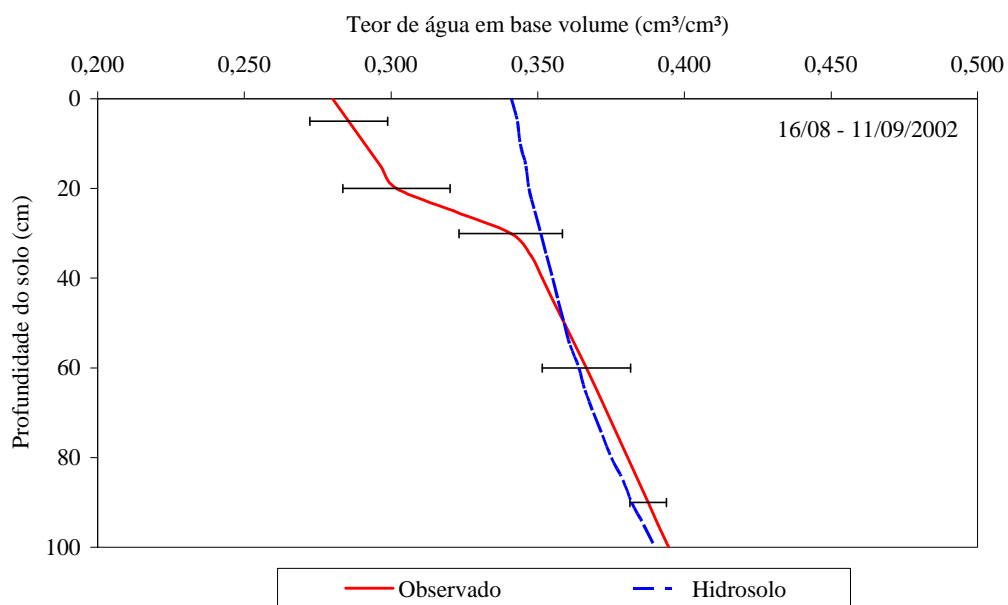


Figura 3A - Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e com irrigação de 18 mm nos dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002.

APÊNDICE 4

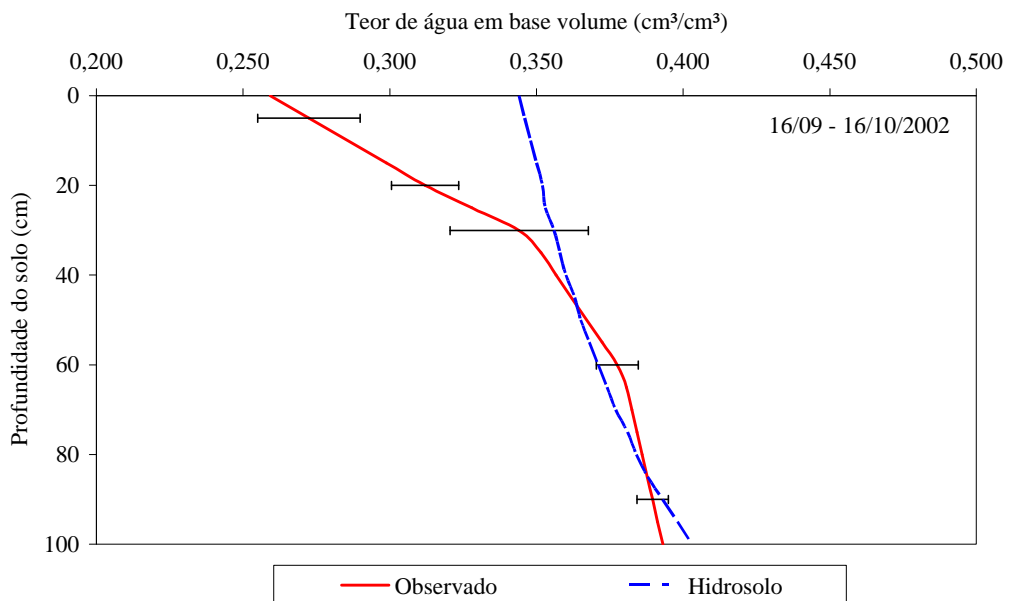
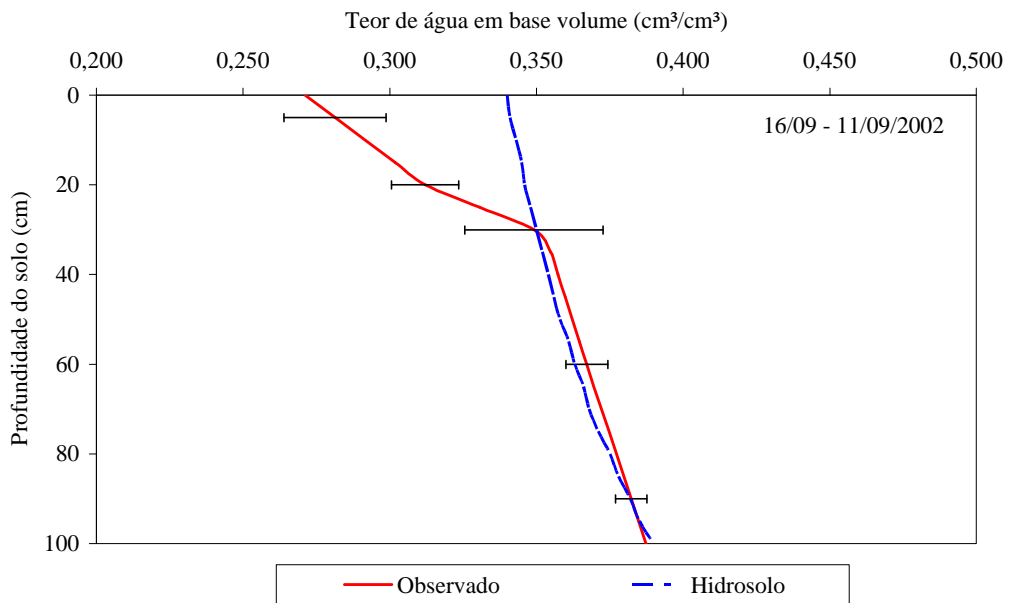


Figura 4A - Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas sem cultura e com irrigação de 45 mm nos dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002.

APÊNDICE 5

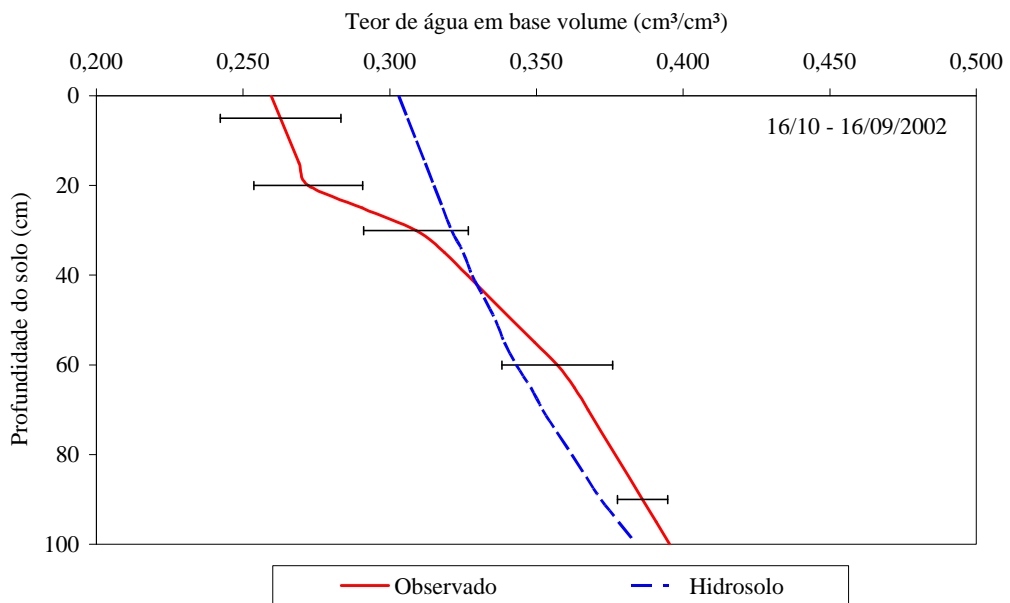
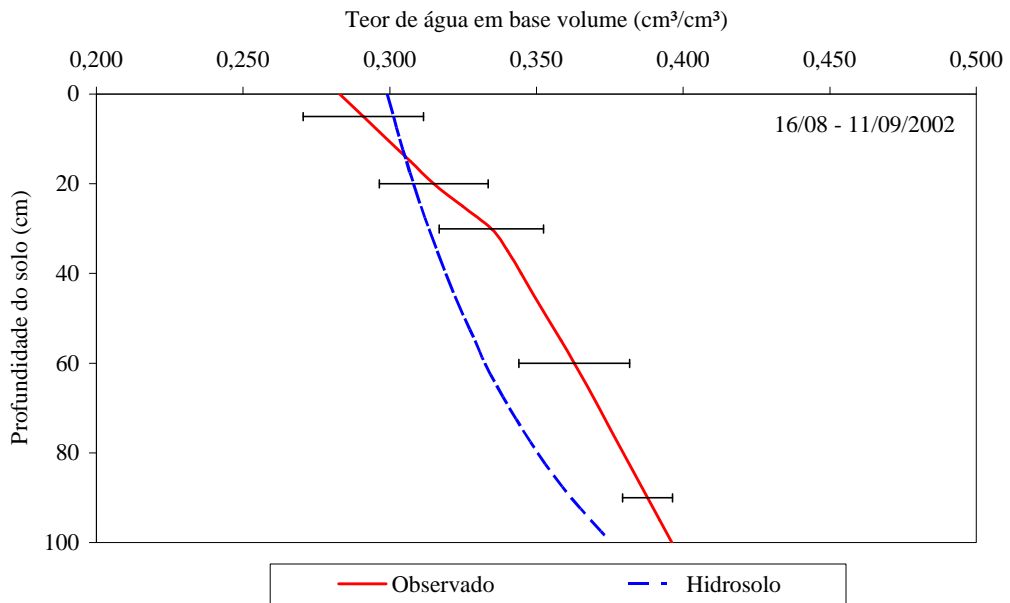


Figura 5A - Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e com irrigação de 18 mm nos dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002.

APÊNDICE 6

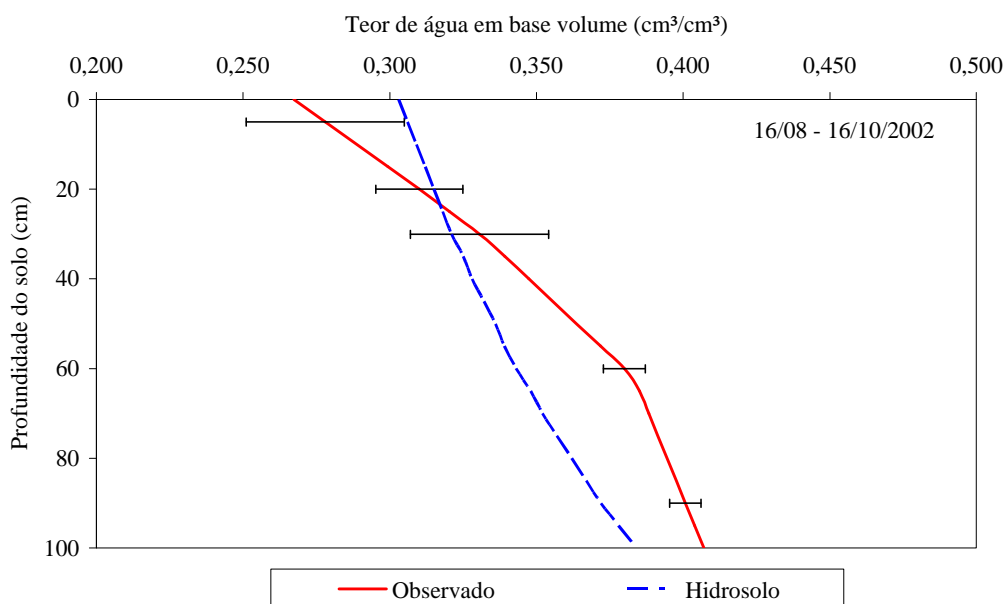
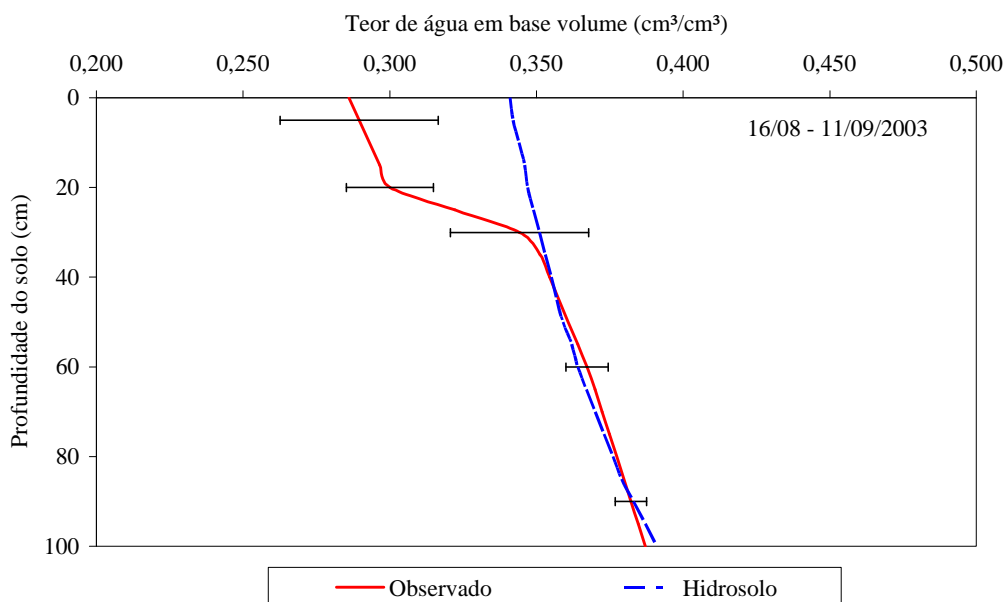


Figura 6A - Perfis de umidade do solo observado e simulado pelo HIDROSOLO, nas parcelas com cultura e com irrigação de 45 mm nos dias 11/09 e 16/10/2002 a partir dos dados do dia 16/08/2002.